

KIT
Universität des Landes Baden-Württemberg
und
nationales Forschungszentrum
in der Helmholtz-Gemeinschaft

PTE Nr. 48

BMW geförderte FuE zu
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 1. Juli - 31. Dezember 2014

Projektträger Karlsruhe
Wassertechnologie und Entsorgung
(PTKA-WTE)

März 2015

PTE-Berichte

Der Projektträger Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE) informiert mit Fortschrittsberichten über den aktuellen Stand der von ihm administrativ und fachlich betreuten FuE.

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

- Endlagerung radioaktiver Abfälle
(PTE Nr. x seit 1991, fortlaufend *)
- Stilllegung und Rückbau kerntechnischer Anlagen
(PTE-S Nr. x seit 2001, fortlaufend)
- Nukleare Sicherheitsforschung
(PTE-N Nr. x seit 2010, fortlaufend)

Die Fortschrittsberichtsreihen sind online verfügbar: www.ptka.kit.edu/wte/287.php

Verantwortlich für den Inhalt sind die Autoren bzw. die entsprechenden Forschungsstellen. Das KIT übernimmt keine Gewähr insbesondere für die Richtigkeit, Genauigkeit und Vollständigkeit der Angaben sowie die Beachtung privater Rechte Dritter.

** Bis Ende des Jahres 2011 wurde in dieser Fortschrittsberichtsreihe auch über die BMBF-geförderte FuE zur untertägigen Entsorgung chemotoxischer Abfälle informiert. Die FuE-Schwerpunkte „Untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle“ und „Sicherheitsforschung für Bergbauregionen“ wurden zum 31.12.2011 beendet.*

Vorwort

Das KIT betreut seit 1991 im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) als Projektträger FuE-Vorhaben auf dem Gebiet „Entsorgung“. Die FuE-Schwerpunkte sind in den Förderkonzepten „Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen“ und „Schwerpunkte zukünftiger FuE-Arbeiten bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle“ sowie deren Fortschreibungen aufgeführt. Seit dem Ende der BMBF-geförderten FuE zur untertägigen Entsorgung chemotoxischer Abfälle im Jahr 2011 ist die Betreuung der FuE zur Endlagerung radioaktiver Abfälle der Tätigkeitsschwerpunkt.

Im Rahmen dieses Auftrages betreut der Projektträger Karlsruhe fachlich und administrativ die vom BMWi im Rahmen des Förderkonzepts geförderten FuE-Vorhaben zu den aufgeführten Themenbereichen:

Endlagerung radioaktiver Abfälle

BMWi Referat II A5

- Endlagersystem
- Systemverhalten und Systembeschreibung
- **Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung**
- Kernmaterialüberwachung

Der vorliegende Fortschrittsbericht dokumentiert Stand und Ergebnisse dieser FuE-Vorhaben. Er wird vom Projektträger *halbjährlich* herausgegeben, um alle Beteiligten über die durchgeführten Arbeiten zu informieren.

Dem Bericht liegt folgendes Gliederungsprinzip zugrunde:

Im Teil 1 sind die FuE-Vorhaben dem jeweiligen Themenbereich zugeordnet.

Im Teil 2, dem Hauptteil, sind die „formalisierten Zwischenberichte“ der FuE-Vorhaben, geordnet nach Förderkennzeichen, aufgeführt. Im Förderkennzeichen bedeuten die Buchstaben

- | | |
|---|--------------------------------------|
| E | ⇒ „Endlagerung radioaktiver Abfälle“ |
| W | ⇒ „Kernmaterialüberwachung“ |

Im Teil 3 sind die FuE-Vorhaben den jeweiligen Forschungsstellen zugeordnet.

Inhaltsverzeichnis

1	Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen	1
1.1	<i>Endlagersystem</i>	<i>1</i>
1.2	<i>Systemverhalten und Systembeschreibung</i>	<i>3</i>
1.3	<i>Kernmaterialüberwachung.....</i>	<i>7</i>
2	Formalisierte Zwischenberichte	9
2.1	E-VORHABEN	9
2.2	W-VORHABEN.....	145
3	Verzeichnis der Forschungsstellen	149

1 Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen

1.1 Endlagersystem

02 E 10689	Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 14
02 E 10719	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 16
02 E 10729	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 18
02 E 10730	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	DBE Technology GmbH, Peine	📖 20
02 E 10740	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 22
02 E 10750	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 24
02 E 10760	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen – Kurztitel: URSEL	DBE Technology GmbH, Peine	📖 26
02 E 10880	Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 40
02 E11061A	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 72
02 E11061B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 74
02 E11061C	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	📖 76
02 E 11092	Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 90

02 E 11132	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 96
02 E 11142	Performance Assessment of Sealing Systems - Kurztitel: PASS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 98
02 E 11152	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 100
02 E 11193A	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 106
02 E 11193B	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	DBE Technology GmbH, Peine	📖 108
02 E 11223	Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Vorprojekt zur Kalkulation und Qualifizierung der Forschungsarbeiten	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 116
02 E 11233	Status Quo der Lagerung C-14-haltiger Abfälle aus deutschen Hochtemperatur- und Forschungsreaktoren und Strategie (Lösungsansatz) zu deren künftigen Endlagerung (CarbonForeSt)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 118
02 E 11243	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborative und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Rekompaktionsverhalten der EDZ (LASA-EDZ)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 120
02 E 11253	Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung – Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden)	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 122
02 E 11263	Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 124
02 E 11294	Entwicklung technischer Konzepte zur Rückholung von Endlagerbehältern mit wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen aus Endlagern in Salz- und Tongesteinsformationen (ERNESTA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 130
02 E 11304	Tonforschung im Untertagelabor Mont-Terri	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 132

1.2 Systemverhalten und Systembeschreibung

02 E 10367	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 10
02 E 10377	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 12
02 E 10810	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel)	Dr. Andreas Hampel, Mainz	📖 28
02 E 10820	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 30
02 E 10830	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 32
02 E 10840	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 34
02 E 10850	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)	Leibniz Universität Hannover	📖 36
02 E 10860	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)	TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig	📖 38
02 E 10890	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 42
02 E 10900	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	DBE Technology GmbH, Peine	📖 44
02 E 10910	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	📖 46

02 E 10941	Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 48
02 E 10951	Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 50
02 E 10961	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 52
02 E 10971	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 54
02 E 10981	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz	Johannes Gutenberg-Universität Mainz	📖 56
02 E 10991	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes	Universität des Saarlandes, Saarbrücken	📖 58
02 E 11001	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München	TU München	📖 60
02 E 11011	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam	Universität Potsdam	📖 62
02 E 11021	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden	TU Dresden	📖 64
02 E 11031	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg	Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg	📖 66
02 E 11041	Kopplung der Softwarecodes FLAC3D und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Untersuchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten in Tongestein unter Endlagerbedingungen	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 68
02 E 11051	Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 70

02 E11062A	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 78
02 E11062B	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	Friedrich-Schiller-Universität Jena	📖 80
02 E11062C	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	Johann Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt am Main	📖 82
02 E11072A	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- K_d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 84
02 E11072B	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- K_d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 86
02 E11082	Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) Phase II – Generierung von Rissystemen einer Auflockerungszone im Korngrößenmaßstab und Überführung der Ergebnisse auf die Makroebene zur Simulation eines Injektionsvorganges	DBE Technology GmbH, Peine	📖 88
02 E11102	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 92
02 E11122	Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 94
02 E11182A	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SAnToS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 102
02 E11182B	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SAnToS	DBE Technology GmbH, Peine	📖 104
02 E11203A	Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 110
02 E11203B	Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 112

02 E11213	Qualifizierung der Rechenprogramme d ³ f und r ³ t, Kurztitel Quader	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 114
02 E 11273	Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Vorprojekt (UMB-V)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 126
02 E 11284	Bentonitaufsättigung in geotechnischen Barrieren im Endlager-Nahfeld (BIGBEN)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 128
02 E 11314	Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen (KORPHA)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 134
02 E 11324	Entwicklung eines chemisch-hydraulischen Modells für die Prognose des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen (LAVA-2)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 136
02 E 11334A	Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 138
02 E 11334B	Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 140
02 E 11334C	Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt C	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 142

1.4 Kernmaterialüberwachung

02 W 6263 Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden

**Forschungszentrum
Jülich GmbH**

 146

2 Formalisierte Zwischenberichte

2.1 E-Vorhaben

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10367
Vorhabensbezeichnung: Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2007 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.224.600,00 EUR	Projektleiter: Reiche

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Inhalt des Vorhabens ist eine Umarbeitung und Anpassung des Programmpakets EMOS zur Analyse der Langzeitsicherheit von geologischen Endlagern für radioaktive Abfälle an moderne Softwareanforderungen. Dabei steht neben der Vereinheitlichung von verwandten Modulen und Versionen sowie der Einführung einheitlicher moderner Datenstrukturen insbesondere die Optimierung von Algorithmen und Ablaufstrukturen im Vordergrund. Moderne, anwendungsorientierte Benutzerschnittstellen werden realisiert. Die Ausgabemöglichkeiten werden erweitert und flexibilisiert. Bei der Umsetzung kommen moderne Programmiersprachen zum Einsatz.

Die Arbeiten dienen als Grundlage für die Durchführung von Modellrechnungen zur integrierten Analyse der Langzeitsicherheit in zahlreichen aktuellen und zukünftigen Projekten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Code-Analyse und Know-how-Transfer.

Alle Codeteile des Programmpakets werden sorgfältig erfasst, katalogisiert und analysiert. Tiefgehende Kenntnisse des Programmaufbaus werden von älteren auf jüngere Mitarbeiter transferiert.

AP2: Erarbeitung eines neuen Programmkonzepts.

In zwei Arbeitsschritten werden neue Konzepte für die Programmierung, für die Datenübergabe sowie für den Programmablauf entwickelt. Dafür werden moderne Strategien angewandt. Die Datenverwaltung wird über ein Datenbanksystem realisiert.

AP3: Codeumstellung und -entwicklung.

Das Arbeitspaket umfasst zwei Arbeitsschritte, von denen der erste die Umstellung aller vorhandenen Module auf eine moderne Programmiersprache unter Beachtung der Konzepte aus AP2 umfasst. Im zweiten Arbeitsschritt wird ein neuer Statistik-Rahmen für die Durchführung probabilistischer Analysen entwickelt.

AP4: Steuerung des Programmablaufs und Anbindung an externe Programme.

Die einzelnen unabhängigen Programmmodule werden in drei Arbeitsschritten miteinander sowie mit externen Programmen verknüpft. Im ersten Schritt werden die globale Programmablaufsteuerung und der Datentransfer zwischen den Modulen neu organisiert. Die weiteren Arbeitsschritte dienen dem Anschluss an externe Programme zur statistischen Analyse und zur grafischen Visualisierung von Ergebnissen.

AP5: Test und Dokumentation.

Im ersten Arbeitsschritt werden mehrere frühere Studien mit dem neuen Programmpaket detailliert nachgerechnet und mit den alten Ergebnissen verglichen. Der zweite Arbeitsschritt dient der ausführlichen Dokumentation der neuen Programme.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Arbeitspaket 1

Zum Erwerb des aktuellen Wissens auf dem Gebiet von Strömungs- und Transportprozessen in porösen Medien wurde an der internationalen Konferenz "Numerical and Mathematical Modeling of Flow and Transport in Porous Media" vom 29.09. zum 3.10. in Dubrovnik (Kroatien) teilgenommen. Auf der Konferenz wurde ein Vortrag über die Konzepte gehalten, die im *RepoTREND*-Modul *COFRAME* zum kolloidbeeinflussten Schadstofftransport in geklüftet-porösen Medien umgesetzt sind (s. Abschnitt 5).

Arbeitspaket 2

Das *RepoTREND*-Modul für statistische Rechenläufe *RepoSTAR* greift auf die externe Bibliothek Simlab 2.0 zu. Wie bereits berichtet wurde, soll die Bibliothek durch eine neue ersetzt werden, die im Rahmen des Projekts MOSEL (FZ 02E10941) unter Mitwirkung des Joint Research Center Ispra (Italien) im 2. Halbjahr 2014 entwickelt wurde. Im Rahmen von zwei Arbeitstreffen mit den Kooperationspartnern vom JRC wurde das Umsetzungskonzept diskutiert und weiterentwickelt bzw. angepasst.

Es wurde mit der Erstellung des Konzepts für das *RepoTREND*-Nahfeldmodul *NaTREND* begonnen. In der aktuellen Arbeitsphase erfolgt die Ermittlung und Analyse von Anforderungen sowie die Evaluierung von vorhandenen Konzepten und Modellen.

Arbeitspaket 3

Es wurde damit begonnen, die bestehende, jedoch wegen der veralteten Simlab-Bibliothek unter modernen Betriebssystemen nicht mehr lauffähige Version des Moduls *Pre-STATIST* (*RepoSTAR*-Modul) zur Ziehung von Parameterstichproben auf die neue Bibliothek Simlab 4.0 umzustellen und zugleich auf Linux zu portieren.

Aufgrund der Umstellung von Linux-Systemen auf eine neue Version wurden Funktionalitäten des Steuerungsscripts erweitert (vor allem Logging).

Eine neue LOPOS-Version wurde erstellt und getestet. Die neue Version enthält Bugfixing sowie Erweiterung der Logging-Funktionalitäten zur besseren und schnelleren Ergebnis- und Fehleranalyse.

Arbeitspaket 5

Eine ausführliche Dokumentation zu dem Modul *BioTREND* in Form eines GRS-Berichts wurde erstellt (s. Abschnitt 5).

Der bei der Fachzeitschrift "Contaminant Hydrology" eingereichte Artikel zu dem in *COFRAME* umgesetzten Modell des kolloidbeeinflussten Nuklidtransport in geklüftet-porösen Medien wurde entsprechend den Anmerkungen von Reviewern überarbeitet und in einer überarbeiteten Version eingereicht.

Die neue Version der grafischen Benutzeroberfläche *XENIA* wurde installiert und ausführlich getestet. Die wichtigsten Änderungen betrafen die Kompatibilität/Zusammenarbeit von *XENIA* mit den Clustern. Die Notwendigkeit dieser Änderungen wurde durch die Einführung neuer, moderner Cluster ausgelöst. Kompilierungs- und Installationsroutinen wurden entsprechend angepasst.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterhin sollen für das Nahfeldmodul *NaTREND* relevanten vorhandene Modelle und Konzepte identifiziert und evaluiert werden.

Im Rahmen des statistischen Frameworks *RepoSTAR* soll die Umstellung des Moduls *Pre-STATIST* zur Stichprobenerstellung auf Linux und die neue Bibliothek Simlab4 abgeschlossen werden. Weiterhin soll – ebenfalls unter Einbindung von Simlab4 – ein Programm mit grafischer Oberfläche zur Auswertung von probabilistischen *RepoTREND*-Rechenläufen entwickelt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Reiche, T., Noseck, U., Schäfer, T.: Migration of contaminants in fractured-porous media in the presence of colloids: effects of kinetic interactions, International Conference on Numerical and Mathematical Modeling of Flow and Transport in Porous Media, 29 Sep. - 3 Okt., 2014, Dubrovnik (Croatia) (<http://nm2porousmedia.math.pmf.unizg.hr/Presentations/Contributed/reiche.pdf>)

Reiche, T., Becker, D.-A.: Berechnung radiologischer Konsequenzen der Freisetzung radioaktiver Stoffe aus einem Endlager in die Biosphäre mit dem Programm *BioTREND*, GRS-Bericht-345, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, 2014

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10377
Vorhabensbezeichnung: Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 31.12.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 4.660.685,00 EUR	Projektleiter: Dr. Zhang

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat die Weiterentwicklung des Wissens zum thermisch-hydraulisch-mechanischen Verhalten von Tonstein, insbesondere im Nahfeld eines HAW-Endlagers, zum Ziel.

Dieses Ziel lässt sich untergliedern in:

- Die Erweiterung der Datenbasis zum THM-Verhalten des Tonsteins durch geeignete Experimente im Labor und in situ.
- Die Weiterentwicklung vorhandener Modellvorstellungen zur Verbesserung der Beschreibung und Berechenbarkeit des THM-Verhaltens des Tonsteins.
- Die Verbesserung bzw. Bereitstellung geeigneter Untersuchungsmethoden.

Diese Ziele werden durch die Beteiligung am neuen ANDRA-Forschungsprogramm für das Untertage-labor Bure (ULB) in den Jahren 2007 bis 2015 und am Mine-By-Experiment im Mont Terri Rock Laboratory (MTRL) erreicht. Neben dem generellen Erkenntniszuwachs sollen die im Rahmen dieses Vorhabens erzielten Ergebnisse bei der Verbesserung von Prozessmodellen sowie bei der Weiterentwicklung des Instrumentariums für die Langzeitsicherheitsanalyse für Endlager in Tongesteinen genutzt werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: *In-situ-Untersuchungen* der mechanisch-hydraulischen Auswirkungen einer Tunnelauffahrung im MTRL auf das umgebende Tonsteingebirge. Diese Untersuchungen werden gemeinsam mit NAGRA, BGR und ANDRA durchgeführt, wobei GRS die Messung von Porenwasserdruck, Permeabilität und Sättigungsänderung übernimmt. Ein anderer In-situ-Test ist die Untersuchung zum Langzeitverformungsverhalten des Opalinuston im MTRL-URL.
- AP2: *Laboruntersuchungen* am Callovo-Oxfordian-Tonstein und Opalinuston zu Langzeitverformung, Quelldruck/Quellverformung, Schädigung und Verheilung sowie am Auffahrungsrückstand aus dem Bure-ULB als Versatzmaterial.
- AP3: *Modellierung* des Mine-By-Experiments, des Langzeitverformungsverhaltens eines Bohrlochtests und der THM-Laborversuche.
- AP4: *Modellentwicklung* für die Schädigung und Verheilung von Tonstein.
- AP5: *Ergebniszusammenführung und Berichterstattung*.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Triaxiale Druckversuche wurden an Tonsteinproben durchgeführt, um diese im ersten Schritt zu schädigen und in einem zweiten Schritt wieder zu verheilen. Als Maß der Schädigung (und auch der späteren Verheilung) dient die Gaspermeabilität, die während der triaxialen Verformung stets gemessen worden ist. Überschreitet die Volumenänderung die Dilatanzgrenze, so kommt es im Gestein zur Rissbildung, und im Bereich der Bruchspannung steigt die Gaspermeabilität sprunghaft um einige Größenordnungen an. Wird nun die geschädigte Probe wieder in den hydrostatischen In-situ-Spannungszustand versetzt, so rekompaktiert die Probe und die Permeabilität verringert sich. Ein empirischer Ansatz der Perkolationstheorie zur Modellierung der Permeabilitätsänderung durch Schädigung und Rekompaktion konnte mit den gewonnenen Laborergebnissen validiert werden.
- Das Verheilungsvermögen von Tongestein mit geringerem Tonmineralanteil und höheren Anteilen von Sand- und Karbonatkomponenten, die denen der Tonformationen der Unterkreide in Norddeutschland ähneln, soll in den nächsten zwei Jahren untersucht werden. Die Versuchsproben stammen aus den sandigen und karbonatigen Schichtungen der Opalinustonformation im Untertagelabor Mont-Terri und der oberen Schichtung der COX-Formation im Untertagelabor Bure. Eine Versuchsanlage mit drei triaxialen Druckzellen wurde gebaut, um das Verheilungsvermögen solcher geschädigter Tonsteinproben bei unterschiedlichen Belastungszuständen zu untersuchen.
- Untersuchungen zur Eignung des Ausbruchmaterials aus der Streckenauffahrung als Versatz- und Verschlussmaterial laufen. Gegenstand ist der Vergleich von Tonstein-Bentonit-Gemischen (60/40; 80/20) mit dem Bentonit-Sand-Gemisch (70/30). Untersucht werden:
 - die Wasseraufnahmefähigkeit bei unterschiedlichen Luftfeuchten,
 - der Wassersättigungsprozess bei drucklosem Kontakt mit Tonformationswasser,
 - die Wasserpermeabilität,
 - der Gasdurchbruchsdruck und die sich einstellende Gaspermeabilität,
 - Bohrlochverschluss in einem Stahlrohr mit kompaktierten Gemisch-Blöcken.
- Zur Modellierung der Permeabilitätsänderungen bei Schädigung und Rekompaktion ist ein Ansatz formuliert worden. Die Vorgehensweise der Implementierung dieses Modellansatzes in das Rechenprogramm CODE-BRIGHT wurde mit UPC/CIMNE im Rahmen eines Konsortiums vereinbart.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Durchführung der Verheilungsversuche an sandigen und karbonatigen Tongestein
- Weiterführung der Versuche am Versatz- und Verschlussmaterial
- Implementierung/Validierung des Kriech- und Permeabilitätsmodells (UPC/CIMNE)

5. Berichte, Veröffentlichungen

DOPAS-Deliverables D3.28 and D5.5: Interim report on characterization and modelling of clay rock and claystone-based seal material, September 2014.

Presentation on the International Geological Conference-GeoFrankfurt2014: Deformation of claystones under effects of stress, humidity and temperature, Goethe Universität Frankfurt a.M. September 2014.

Poster-Presentation on the DAEF-Conference 2014: Self-Sealing of Excavation Induced Fractures in Clay Host Rock, Köln, September 2014.

Zhang, C.L. (2014): Investigation of gas migration in damaged and resealed claystone, in the Proceedings – Gas Generation and Migration in Deep Geological Radioactive Waste Repositories (edited by SHAW, R.P.), The Geological Society of London, 2014.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10689
Vorhabensbezeichnung: Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2009 bis 31.08.2014	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.08.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.003.689,00 EUR	Projektleiter: Wieczorek

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit Blick auf die Langzeitsicherheit eines Endlagers im Tonstein ist ein vertieftes Verständnis gekoppelter Prozesse im Nahfeld in der frühen Nachbetriebsphase notwendig, da das Verhalten der EBS in dieser Phase einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf den späteren Zustand haben kann. Das EU-kofinanzierte Projekt PEBS der Partner BGR, NAGRA, SKB, GRS, ENRESA, AITEMIN, CIMNE, UDC, CIEMAT, ANDRA, UAM, DM Iberia, Solexperts, TK Consult, Clay Technology, BRIUG und JAEA ist der Verbesserung des Verständnisses der im Nahfeld ablaufenden THM-C-Prozesse und der Verringerung in der Unsicherheit ihrer Beschreibung gewidmet, um dadurch den Nachweis zu ermöglichen, dass die EBS ihre Sicherheitsfunktion erfüllt. Diese Ziele sollen seitens GRS durch Laboruntersuchungen insbesondere zum thermischen Verhalten von Puffermaterialien und Tongestein, durch In-situ-Messungen im Rahmen eines Validierungsexperimentes im Mont Terri URL, durch Modellrechnungen zur Vorhersage und Auswertung dieses Experimentes sowie zur Extrapolation auf lange Zeiträume und durch Mitarbeit bei der Analyse der gesamten Ergebnisse in Bezug auf die Sicherheitsfunktion der EBS unterstützt werden. Die Ergebnisse des Projekts haben direkten Einfluss auf die Endlagerkonzeption und -auslegung und ergänzen damit die Arbeiten des Projekts ERATO.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Laboruntersuchungen an Tonstein und Puffermaterial

AP2: Erhitzerversuch in Mont Terri

AP3: Prozessmodellierung

AP4: Langzeitsicherheitsbetrachtung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Arbeiten zu den APs wurden im Berichtszeitraum beendet und die erforderlichen Deliverables (D3.5-4: Modellierungsergebnisse aller Projektpartner zur Langzeitextrapolation und D4.1: Analyse der experimentellen Arbeiten und der Prozessmodellierung hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Tonendlagers) finalisiert. Der GRS-Abschlussbericht zu PEBS wurde beim Projektträger eingereicht und wird in Kürze gedruckt.

Die Mont Terri Experimente HE-E und FE werden weitergeführt. GRS war an diesen Experimenten bisher im Rahmen von PEBS beteiligt. Seit dem 01.09.2014 wird die Beteiligung unter einem neuen Vorhaben fortgesetzt (Tonforschung im Untertagelabor Mont Terri, FKZ 02E11304).

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K. (Ed.), Czaikowski, O., Gaus, I., Gens, A., Kuhlmann, U., Mon, A., Montenegro, L., Naves, A., Samper, J., Sanchez, M., Senger, R., Vasconcelos, R. (2014): Extrapolation of the models developed to the repository long-term evolution and evaluation of uncertainties, Deliverable D3.5-4 of the PEBS project.

Johnson, L., Gaus, I., Wieczorek, K., Mayor, J.C., Sellin, P., Villar, M.-V., Samper, J., Cuevas, J.A., Gens, M., Velasco, M., Turrero, M.J., Montenegro, L., Martin P.-L., Armand G. (2014): Integration of the Short-term Evolution of the Engineered Barrier System (EBS) with the Long-term Safety Perspective, Deliverable D4.1 of the PEBS project.

Wieczorek, K., O. Czaikowski, R. Miehe (2014): Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems (PEBS) – GRS Participation, GRS-353, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, December 2014.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10719
Vorhabensbezeichnung: Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2009 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.429.690,00 EUR	Projektleiter: Dr. Wolf	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben knüpft unmittelbar an die Ergebnisse des FuE-Vorhabens ISIBEL an. Ziel ist die Vervollständigung des bereits verfügbaren Instrumentariums zur technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar.

Schwerpunkte bilden dabei die Entwicklung von alternativen Szenarien für den Sicherheitsnachweis, die Untersuchung der Anwendbarkeit von natürlichen Analoga, der Langzeitnachweis für Verschlussbauwerke, Untersuchungen von Instrumentarien auf Prozesslevel, die Analyse von Gasbildungs- und -transportprozessen sowie die konzeptionelle und numerische Umsetzung der Referenz- und Alternativszenarien in Modelle für den Langzeitsicherheitsnachweis. An Hand des internationalen Standes von Wissenschaft und Technik wird untersucht, wie die neu gewonnenen Erkenntnisse und die Ergebnisse von bereits abgeschlossenen FuE-Vorhaben zu einem Sicherheitsnachweis zusammengeführt werden können.

Die gemeinsame Bearbeitung durch DBE TEC, BGR und GRS gewährleistet eine umfassende und ausgewogene Betrachtung aller Instrumente, die in den verschiedenen Teilen einer Sicherheitsanalyse erforderlich sind. Für die Untersuchungen zum Langzeitnachweis für Verschlussbauwerke wird außerdem das Institut für Endlagerforschung der TU-Clausthal hinzugezogen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Entwicklung von alternativen Szenarien (gestrichen, s. Halbjahresbericht 2011/1)

AP2: Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlusskonzepte

AP3: Untersuchungen von Instrumentarien für Prozessanalysen

AP4: Gasprozesse

AP5: Detaillierte Untersuchungen zum Referenzszenario und zu Alternativszenarien

AP6: Anwendbarkeit von Natürlichen Analoga

AP7: Abschlussbericht/Publikation der ISIBEL-Ergebnisse

AP8: Entwicklung einer Methodik zur anforderungsorientierten Konzeption eines HAW-Endlagers und zur Konzeptoptimierung

AP9: Arbeiten zum FEP-Katalog

GRS ist federführend für die Arbeitspakete 3, 4, 5 und 6.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP3: Es wurde begonnen, den Bericht zu den geochemischen Rechnungen um eine Bewertung der vorhandenen Ergebnisse aus Sicht der Führung eines Langzeitsicherheitsnachweises, zu erweitern. Für die hydrogeologischen Rechnungen zum Deckgebirge über dem Salzstock Gorleben wurden notwendige Modifikationen am Programmcode d³f getestet.
- AP4: Das Arbeitspaket ist mit der Veröffentlichung des Abschlussberichts abgeschlossen.
- AP5: Die Überprüfung des für die Konsequenzenanalyse zur Verfügung stehenden probabilistischen Instrumentariums wurde fortgeführt. Das Referenzszenarium und mehrere Alternativszenarien aus der VSG wurden mit dem Programm RepoTREND umgesetzt und analysiert. Die Ergebnisse wurden auf Arbeitstreffen mit den Projektpartnern DBE Technology und BGR am 17.09. und 21.11. vorgestellt und diskutiert. Des Weiteren wurde die für das Referenzszenarium entwickelte Methode zur Umsetzung von Szenarien in probabilistische Rechnungen auf die Alternativszenarien ausgeweitet.
- AP6: Die Endredaktion des Berichtes wurde 2014 abgeschlossen.
- AP7: Der Abschlussbericht wurde im Jahr 2013 veröffentlicht.
- AP9: Die GRS hat an der Diskussion zur neuen NEA FEP-Datenbank beim Treffen der NEA FEP Task Group am 06. Oktober in Paris teilgenommen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Der Bericht zu den geochemischen Rechnungen und den hydrogeologischen Rechnungen wird im Laufe des Jahres 2015 veröffentlicht.
- AP4: Das Arbeitspaket ist mit der Veröffentlichung des Abschlussberichts abgeschlossen.
- AP5: Die Überprüfung des für die Konsequenzenanalyse zur Verfügung stehenden probabilistischen Instrumentariums wird fortgeführt. 2015 steht insbesondere der Vergleich probabilistischer Ergebnisse mit den regulatorischen Vorgaben im Vordergrund.
- AP6: Im Jahr 2015 erfolgt die Veröffentlichung des Berichtes.
- AP7: Das Arbeitspaket ist mit der Veröffentlichung des Abschlussberichts abgeschlossen.
- AP9: Teilnahme der GRS am Treffen der NEA FEP Task Group (voraussichtlich im Oktober in Paris). Sobald wie möglich wird geklärt, wie der FEP-Katalog aus ISIBEL und VSG in die neu entwickelte Datenbank der NEA eingespeist werden kann.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10729
Vorhabensbezeichnung: Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2009 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.283.972,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krone	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben knüpft unmittelbar an die Ergebnisse des FuE-Vorhabens ISIBEL an. Ziel ist die Vervollständigung des bereits verfügbaren Instrumentariums zur technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar.

In diesem Kontext werden speziell die Entwicklung von alternativen Szenarien, die Anwendbarkeit von natürlichen Analoga, der Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlussbauwerke, Instrumentarien auf Prozesslevel, Gasbildungs- und -transportprozesse, die konzeptionelle und numerische Umsetzung der Referenz- und Alternativszenarien in Modelle, die Methodenentwicklung zur anwendungsorientierten Konzeption/Optimierung eines HAW-Endlagers sowie die Arbeiten zum FEP-Katalog fortgeführt. Anschließend wird analysiert, wie die neu gewonnenen Erkenntnisse und die Ergebnisse von bereits abgeschlossenen FuE-Vorhaben zu einem Sicherheitsnachweis zusammengeführt werden können.

Die gemeinsame Bearbeitung durch DBE TECHNOLOGY GmbH, BGR und GRS gewährleistet eine vollständige und ausgewogene Betrachtung aller erforderlichen Instrumente für die Sicherheitsanalyse. Für die Untersuchungen zum Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlussbauwerke wird außerdem das Institut für Endlagerforschung der TU-Clausthal hinzugezogen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung von alternativen Szenarien
- AP2: Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlusskonzepte
- AP2A: Ergänzung des endzulagernden Inventars
- AP3: Untersuchungen von Instrumentarien für Prozessanalysen
- AP4: Gasprozesse
- AP5: Detaillierte Untersuchungen zum Referenzszenario und zu Alternativszenarien
- AP6: Anwendbarkeit von Natürlichen Analoga
- AP7: Abschlussbericht/Publikation der KOMTESSA-Ergebnisse
- AP8: Entwicklung einer Methodik zur anforderungsorientierten Konzeption eines HAW-Endlagers und zur Konzeptoptimierung
- AP9: Arbeiten zum FEP-Katalog

DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für die Arbeitspakete 2, 2A, 7 und 8 tätig und weiterhin am AP3 und AP9 beteiligt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlusskonzepte:
Der Abschlussbericht der TU Clausthal ist frei gegeben, fertig gestellt und gedruckt.
- AP2A: Ergänzung des endzulagernden Inventars:
Der Abschlussbericht ist intern frei gegeben und fertig gestellt.
- AP3: Thermomechanische Berechnungen:
Die Rechenergebnisse wurden im Abschlussbericht (s. u.) dokumentiert.
- AP7: Abschlussbericht:
Der englische Abschlussbericht wurde Anfang 2014 verteilt.
- AP8: Entwicklung einer Methodik zur anforderungsorientierten Konzeption eines HAW-Endlagers und zur Konzeptoptimierung:
Die Überprüfung der Konzeptentwicklung am Beispiel Gorleben und anderen internationalen Projekten hat eine weitgehend einheitliche Vorgehensweise zur Konzeptfindung ergeben. Kriterien für die Entwicklung des Endlagerkonzeptes wurden aus funktionalen (z. B. Sicherheits- und Nachweiskonzept, Rückholbarkeit), operativen, technischen und regulatorischen Anforderungen, Einschränkungen durch Standortbedingungen bzw. Interessengruppen abgeleitet. Aus einer spezifizierten Anforderung ergibt sich aber nicht das stringente Erfordernis einer ganz speziellen Vorgehensweise oder konzeptionellen Maßnahme. Dasselbe Ziel kann auf unterschiedliche Art und Weise, z. B. durch verschiedene Behälter- und Einlagerungskonzepte, realisiert werden. Ein wichtiger methodischer Schritt für die Anpassung des Endlagerkonzeptes an die standortspezifischen Verhältnisse wird in der iterativen Optimierung des Endlagerkonzeptes durch die Berücksichtigung der Ergebnisse der Sicherheitsanalysen gesehen.
- AP9: Arbeiten zum FEP-Katalog:
Der VSG-FEP-Katalog soll in die NEA-FEP-Datenbank übernommen werden. Zur Vorbereitung beteiligen sich DBETEC und GRS an den Arbeitstreffen der NEA-Task-Group "FEP-Catalogue".

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP8: Die Untersuchungen zur methodischen Vorgehensweise sollen in der vorgesehenen Weise fortgeführt werden. Im 3. Schritt sollen dann Beispiele für die anforderungsgerechte Endlagerkonzeption und –optimierung dargestellt werden.
- AP9: Ermittlung der Rahmenbedingungen und des Procederes beim Einstellen des VSG-FEP-Kataloges in die NEA-Datenbank.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Bollingerfehr, W., Buhmann, D., Filbert, W., Keller, S., Krone, J., Lommerzheim, A., Mönig, J., Mrugalla, S., Müller-Hoeppe, N., Weber, J.R. & Wolf, J. (2013): Status of the safety concept and safety demonstration for an HLW repository in salt. Summary report.- FKZ 02E10719 and 02E10729, Bericht-Nr. TEC-15-2013-AB, Peine.

Röhlig, K. J., Plischke, E. & Xiaoshuo Li (2014): Probabilistische Methoden als Hilfsmittel zur Bemessung von Verschlussbauwerken für ein Endlager im Salinar.- Inst. f. Endlagerforschung, TU Clausthal, ISBN: 978-3-943917-99-4, Clausthal.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10730
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2010 bis 31.10.2014	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.10.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 463.328,00 EUR	Projektleiter: Dr. Franz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben REPOPERM Phase 2 soll mit Hilfe eines gezielten Laborversuchsprogramms und aktuell zur Verfügung stehender Modelle und Codes der Wissensstand über das Stoffverhalten von Salzgrus im Bereich geringer Porositäten und Permeabilitäten verbessert werden. Auf dieser Grundlage soll die Signifikanz einzelner Prozesse im Hinblick auf den sicheren Einschluss der radioaktiven Abfälle im Wirtsgestein und damit der Langzeitsicherheit des Endlagers überprüft werden.

Da in den bisherigen Arbeiten zu diesem Thema überwiegend trockener Versatz betrachtet wurde und nur wenige Ergebnisse aus dem Bereich kleiner Porositäten (< 10 %) vorliegen, soll im Rahmen dieses Vorhabens die Entwicklung der mechanischen und hydraulischen Parameter bei geringen Porositäten versuchsgestützt untersucht werden. Die Auswirkungen eines Lösungskontaktes auf die HM-Eigenschaften des Salzgrusversatzes sollen ebenfalls durch Laborversuche geklärt und die daraus resultierenden Konsequenzen für die Wirksamkeit der Salzgrusbarriere überprüft werden. Basierend auf den Laboruntersuchungen sollen die Berechnungsmodelle für die Kompaktion von Salzgrus verbessert werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Relevante Szenarien und Randbedingungen

AP2: Laborversuche

AP3: Stoffgesetze und Modellberechnungen

AP4: Auswertung und Berichtserstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde der Abschlussbericht zu diesem Vorhaben für die Arbeiten von DBE TECHNOLOGY GmbH erstellt. Die Arbeiten der Verbundpartner gehen weiter. Im Folgenden sind die Ergebnisse kurz zusammengefasst.

Die Dünnschliffanalysen zeigten, dass sich die verbleibenden Wegsamkeiten mit zunehmender Kompaktion der Probe vermehrt an den Korngrenzen größerer Körner befinden. Die Zugabe von 1,2 % Salzlösung während der Kompaktion hatte die Auswirkung, dass die Feinkörner im Feinkornbereich "verbacken", was zur Bildung neuer Kristallstrukturen führte, so dass der Anteil an Feinkörnern in diesem Bereich erheblich reduziert war. Im Gegensatz dazu führte die Zugabe von Feuchtluft während der Kompaktion nicht zu einem "Verbacken". Die Probe, die nach trockener Kompaktion mit Lauge durchströmt wurde, weist zahlreiche lokale "Hot Spots" auf. Das deutet darauf hin, dass es während der Durchströmung zu einem Auswaschen gekommen ist und damit zu der Bildung eines Systems von kommunizierenden Röhren. Für die reale Situation in einem Endlager, wo Salzgrus als Verfüllmaterial für die Strecken verwendet wird, könnte das bedeuten, dass das Auftreten eines frühzeitigen Laugendruckes im Versatzmaterial, d. h. wenn es noch nicht vollständig kompaktiert ist, zur Bildung eines ungewollten Großporensystems führen könnte, das für einen bestimmten Zeitraum bestehen bleibt, bis es durch die Konvergenz kompaktiert und geschlossen wird.

Für die Analyse, inwieweit die Kompaktion von körnigem Steinsalz mit der Diskrete Element Methode auch bis in kleine Porositätsbereiche simuliert werden kann, wurden zwei verschiedene Computer Codes verwendet, der PFC3D und der 3DEC Computer Code. Während der Analyse traten bei beiden Codes Probleme auf, die unter anderem mit der Bestimmung der Porosität zusammenhängen und meist mit den benötigten Rechenzeiten in Verbindung stehen, die weit außerhalb praktischer Anwendbarkeit lagen. Die Auswirkungen von zeitabhängigem Kriechen auf das mechanische Verhalten konnten in den Simulationen nicht berücksichtigt werden. Bei 3DEC traten erhebliche numerische Probleme hauptsächlich hinsichtlich der Detektion von Partikelkontakten auf. Abschließend ist festzuhalten, dass beide Codes erhebliche Verbesserungen benötigen, bevor sie zur Simulation von Kompaktionsprozessen bis in kleine Porositätsbereiche verwendet werden können.

Proben mit deutlichen Porositätsunterschieden wurden einer computertomographischen Analyse unterzogen. Die Analyse zeigte, dass der Porenraum hinsichtlich Konnektivität als isotrop angesehen werden muss. Häufig wird die Porengeometrie von kristallographischen Ebenen bestimmt, was darauf hindeutet, dass diese Poren mit der Bildung von Fluideinschlüssen, die an sich nicht miteinander verbunden sind, in Verbindung stehen. Mittels rechnerisch rekonstruierter Porenstrukturen, lässt sich die sogenannte kritische Porosität (Perkolationsschwelle) ermitteln. Insgesamt lässt sich feststellen, dass bei Porositäten von mehr als 5 % von einem verbundenen und damit durchströmbaren Porennetzwerk ausgegangen werden muss. Bei Porositäten von 1 % oder weniger kann davon ausgegangen werden, dass das Porennetzwerk nicht verbunden ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M., Müller, C., Schirmer, S. (2014). Remaining porosity and permeability of compacted crushed rock salt backfill in a HLW repository, Final Report, DBE TECHNOLOGY contribution, Peine

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10740
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2010 bis 31.10.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.802.564,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kröhn	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (HAW) in geologischen Steinsalzformationen sieht die Einbringung verglasteter HAW-Kokillen, teils auch die direkte Endlagerung von 5 m langen Brennstabkokillen in tiefen vertikalen Bohrlöchern und die direkte Endlagerung von Brennelementen in selbstabschirmenden Pollux-Behältern in horizontalen Strecken vor. Einlagerungs-Bohrlöcher und -Strecken werden für den völligen Einschluss der Abfälle im Wirtsgestein mit artgleichem Salzgrusversatz verfüllt. Anhand der bisherigen Ergebnisse kann nicht sicher genug abgeschätzt werden, welcher Kompaktionsgrad und welche Restporosität/-permeabilität erreicht werden, und welche Konsequenzen sich für Langzeitsicherheitsanalysen ergeben.

Es wird ermittelt, welche Prozessabläufe hinsichtlich des vollständigen Einschlusses eine besondere Signifikanz besitzen. Experimentelle und modelltheoretische Arbeiten ergänzen die in Repoperm-1 erzielten Ergebnisse und dienen der Verbesserung der Stoffgesetze.

Ziel ist, den Wissensstand über das Stoffverhalten von Salzgrus im Bereich geringer Porositäten und Permeabilitäten zu verbessern und die relevanten Prozesse bei der Konsolidierung von Salzversatz zu ermitteln.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete von der GRS bearbeitet:

- AP1: Relevante Szenarien und Randbedingungen
- AP2: Laborversuche
- AP3: Stoffgesetze und Modellrechnungen
- AP4: Auswertung und Berichtserstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum fand ein Treffen der Gruppe „Stoffmodelle“ statt.

Beim Langzeitkompaktionsversuch war die trockene Probe mit gesättigter Salzlösung geflutet worden. Danach ging die Porosität rapide zurück. Am Jahresende nach 6 ½ Monaten lag die Porosität rechnerisch bei 0,9 %. Die Drücke auf die Proben mit 0,1 % (Anlieferungsfeuchte)

und 1 % Anfangsfeuchtigkeit wurden nicht verändert. Um eine mögliche Temperaturabhängigkeit der Kompaktion nach einer vollständigen Aufsättigung zu identifizieren, wurde auch die Probe mit 0,1 % Feuchtigkeit mit gesättigter Salzlösung geflutet. In den verbleibenden knapp 6 Wochen ging die Porosität von 9,6 % auf 1,3 % zurück. Die Probe mit 1 % Anfangsfeuchte unterschritt im letzten Quartal rechnerisch den Wert von 0 % für die Porosität. Daher soll dieser Versuch abgebrochen werden, um durch eine Nachuntersuchung festzustellen, was zu diesen problematischen Werten geführt hat. Vor dem Ausbau soll jedoch noch der Gaseindringdruck ermittelt werden.

Das Messprogramm zur Bestimmung der Zweiphasenflussparameter wurde entsprechend den Erkenntnissen des Vorversuchs abgeändert und der Pilotversuch an 2 weiteren Proben mit vergleichbaren Materialparametern gestartet. Beide Proben wiesen eine Porosität von 7,7 % und eine mittlere Einbaudichte von 2.016 g/cm^3 auf. Die Gaspermeabilität betrug $2.27\text{E-}14 \text{ m}^2$ bzw. $3.1\text{E-}14 \text{ m}^2$. Aufgrund eines technischen Fehlers bei der Aufsättigung der Proben mit gesättigter Lauge aus Gorleben Salz, der sich erst im Verlauf des Versuchs bei der Bestimmung der Zweiphasenparameter herausstellte, musste der Versuch jedoch abgebrochen werden. Ersatzweise wurden zwei neue Proben hergestellt, die nunmehr eine Porosität von 8,0 % und 7,2 % entsprechend einer mittleren Einbaudichte von 2.008 g/cm^3 und 2.026 g/cm^3 . Mit den Versuchen wird Anfang 2015 begonnen.

Die Messdaten des etwa ein Jahr lang laufenden Kompaktionsversuchs im Autoklaven deuten eine Kompaktion der drei übrig gebliebenen Proben (0,3 %, 0,6 % und 2,0 % Anfangsfeuchte) in den Bereichen zwischen 1,5 % und 6 % Porosität an. Dies bleibt durch eine Nachuntersuchung zu bestätigen. Über den Abbruch des Versuchs wird Anfang 2015 nach aktueller Datenlage entschieden.

Ein Stoffmodell für vertrauenswürdige Vorhersagen unter In-situ-Bedingungen sollte neben dem Versuch, für den die Parameter kalibriert wurden, wenigstens einen unabhängigen, weiteren Versuch in vergleichbarer Qualität nachbilden können. Sowohl GRS als auch BGR haben jeweils ein Stoffmodell anhand eines weggeregelter Oedomerversuches der BGR erstellt und versucht, den spannungsgesteuerten Kompaktionsversuch der GRS mit trockenem Material modellhaft nachzubilden. Dies ist nicht gelungen. Die Ursache ist noch unklar. Die Simulation des Versuchs mit feuchtem Material ist zurzeit nur mit CODE_BRIGTH möglich. Auch hier ist das Ergebnis unbefriedigend und im Bereich kleiner Porositäten zusätzlich auch bezüglich der Messdaten noch stark unsicher (s. o.).

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung des Langzeitkompaktionsversuchs in trockener Atmosphäre; Ausbau und Nachuntersuchung der feuchten Probe
- Beendigung und Auswertung des triaxialen Autoklavversuchs
- Durchführung des Pilotversuchs zur Ermittlung von Zweiphasenflussparametern
- Diskussion der Widersprüche in den Modellansätzen
- THM-gekoppelte Modellierung
- Erstellung des Abschlussberichtes

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10750
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen – Kurztitel: URSEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.09.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 552.070,00 EUR	Projektleiter: Dr. Flügge	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Aufbauend auf den Projekten ASTER und WIBASTA soll die deutsch-russische Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Klärung methodischer Fragen der sicherheitlichen Bewertung aber auch der Standortcharakterisierung und -bewertung sowie der Konzeptoptimierung fortgesetzt werden.

Das Projekt orientiert sich an den von russischer Seite im Rahmen des föderalen Zielprogramms „Radiologische Sicherheit“ geplanten Arbeiten zur Erkundung des vorgesehenen Endlagerstandortes Jennissejskij für die erste Ausbaustufe eines Endlagers für gering wärmeentwickelnde langlebige Abfälle und eines Untertagelabors für die Endlagerung stark wärmeentwickelnder hochradioaktiver Abfälle an diesem Standort.

Zur sicherheitlichen Bewertung eines potenziellen HAW-Endlagers in Russland sollen daher die Arbeiten aus ASTER und WIBASTA für das Untersuchungsgebiet Jennissejskij fortgesetzt und aktualisiert werden.

Insgesamt wird das Vorhaben dazu beitragen, die Wissensbasis und das Beurteilungsvermögen zu HAW-Endlagerkonzepten in magmatischen Wirtsgesteinen weiterzuentwickeln, um für die drei grundsätzlich in Frage kommenden Wirtsgesteine über eine wissenschaftlich fundierte Entscheidungsbasis zu verfügen. Die gemeinsame Bearbeitung durch DBE TECHNOLOGY, BGR und GRS gewährleistet eine umfassende und ausgewogene Betrachtung, die in den verschiedenen Teilen einer Sicherheitsanalyse erforderlich sind.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Ausgangsdaten und Sicherheitsnachweiskonzept

AP2: Begleitung und Optimierung der weiterführenden Erkundungsarbeiten

AP3: Auswertung der neuen Erkundungsergebnisse

AP4: Optimierung des Endlagerkonzeptes

AP5: Präzisierung des sicherheitsanalytischen Modells und Bewertung möglicher radiologischer Konsequenzen

AP6: Vorläufige Bewertung der Robustheit und Sicherheit des Endlagersystems

AP7: Projektkoordination

Die GRS ist beteiligt an den Arbeitspaketen 2, 5 und 6.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

An den im Juni 2013, an die beteiligten deutschen Organisationen übergebenen Proben aus der Kernbohrung R12, wurden die Messungen der Permeabilität fortgeführt. Dabei wird eine synthetische Lösung verwendet, deren chemische Zusammensetzung der des Grundwassers am Standort Jenissejskij entspricht. Die Messungen wurden für drei Proben bereits abgeschlossen und Ende 2015 befand sich die vierte der acht Proben in Bearbeitung.

Mit dem Code r³t wurden Transportrechnungen für einen inerten Tracer und für das Radionuklid Cs-135 durchgeführt. Die Ergebnisse wurden ausgewertet und mit den Projektpartnern diskutiert. Für die aktualisierten Transportrechnungen mit RepoTREND wurden Sensitivitätsanalysen für das Nah- und Fernfeld durchgeführt. Die Parameter, die den größten Einfluss auf die Radionuklid- ausbreitung haben, konnten identifiziert werden.

Die Beschreibung der sicherheitsanalytischen Rechnungen und der Grundwassermodellierung wurde weitergeführt. Der Zwischenbericht wurde finalisiert und den Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

Auf zwei Projekttreffen am 30.07.2014 in Peine und am 06.11.2014 in Moskau mit Beteiligung der deutschen und der russischen Projektpartner wurden die Ergebnisse, besonders die Ergebnisse der hydrogeologischen Feldarbeiten und die Simulationsergebnisse der verschiedenen Arbeitsgruppen zur Hydrogeologie des Standortes, intensiv diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die vier noch nicht von GRS hinsichtlich der Permeabilität für die oben genannte synthetische Lösung analysierten Kernproben werden im Folgenden untersucht. Bei mindestens zwei der vier Proben wird erwartet, dass die Permeabilität so gering ist, dass keine Bestimmung möglich sein wird. Die Ergebnisse der Laboruntersuchungen werden im Anschluss an die Untersuchungen in einem Bericht gemeinsam mit BGR zusammengefasst und den russischen Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

Die sicherheitsanalytischen und hydrogeologischen Rechnungen werden laufend an die neuen Ergebnisse der Laboruntersuchungen von GRS und BGR angepasst. Auf der Basis der im zweiten Halbjahr 2014 durchgeführten Transportrechnungen für einen inerten Tracer und Cs-135 werden realistischere Transportrechnungen für weitere dosisrelevante Radionuklide durchgeführt.

Die Beschreibung der sicherheitsanalytischen Rechnungen und der Grundwassermodellierung wird weitergeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Flügge, J.; Noseck, U.; Schneider, A.; Wolf, J. (2014): Evaluating Radionuclide Transport Through Fractured Media in Long-Term Safety Assessments. 41st International Congress of the International Association of Hydrogeologists. 15-19 September 2014, Marrakech, Morocco

Jobmann, M., Flügge, J., Hammer, J., Krone, J., Kühnlitz, T., Meleshyn, A., Wolf, J. (2014): Site-specific evaluation of safety issues for high-level waste disposal in crystalline rock, Technical Report, DBE TECHNOLOGY, BGR, GRS, Peine, Hannover, Braunschweig.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10760
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen – Kurztitel: URSEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.09.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 848.119,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krone	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zielsetzung dieses Vorhabens besteht darin, für ein HAW-Endlager in magmatischen Gesteinen (z. B. Granit) mit einer komplexen geologischen Struktur einen methodischen Ansatz für die sicherheitliche Bewertung, Optimierung sowie Beurteilung der Robustheit des Endlagersystems und der Sicherheitlichkeitaussage zu erarbeiten und beispielhaft zu erproben. Im Unterschied zu den Endlagerkonzepten im Ton und Salz kann bei der Endlagerung im Granit nicht von einem vollständigen Einschluss der Abfälle durch das Wirtsgestein ausgegangen werden. Mögliche Einschränkungen des Isolationspotenzials der geologischen Barriere werden maßgeblich durch die vorhandenen Kluftsysteme und ihre wahrscheinliche weitere Entwicklung bestimmt. Im Zusammenhang mit der eingeschränkten Kenntnis über die aktuell und zukünftig vorliegenden Kluftsysteme und die damit verbundenen Unsicherheiten wird die Frage geklärt, inwieweit die Sicherheit sich auf weitere Rückhaltefunktionen der geologischen Barriere stützen kann und was die zusätzlichen technischen Barrieren leisten müssen, damit der Nachweis der Einhaltung der Schutzziele mit einer hinreichenden Robustheit geführt werden kann.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Ausgangsdaten und Sicherheitsnachweiskonzept
- AP2: Begleitung und Optimierung der weiterführenden Erkundungsarbeiten
- AP3: Auswertung der neuen Erkundungsergebnisse
- AP4: Optimierung des Endlagerkonzeptes
- AP5: Präzisierung des sicherheitsanalytischen Modells und Bewertung möglicher radiologischer Konsequenzen
- AP6: Vorläufige Bewertung der Robustheit und Sicherheit des Endlagersystems sowie seine weitere Optimierung
- AP7: Projektkoordination

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen der Projektkoordination erfolgte die Vorbereitung und Durchführung eines weiteren deutsch-russischen Arbeitstreffens in Moskau am 06.11.2014. An diesem Treffen nahmen von russischer Seite neben VNIPI PT auch der Nationale Endlagerbetreiber NO.RAO. und das Geologische Institut Krasnojarsk teil.

Auf dem Treffen wurden u. a. folgen Themenstellungen intensiv diskutiert:

- die hydrogeologische Situation am geplanten Standort in Krasnojarsk
- Untersuchungen und Berechnungsergebnisse zur Grundwasserströmung und zur Migration von Radionukliden.

Seitens VNIPI PT wurde den deutschen Partnern im Vorfeld ein lithologisches Profil übergeben, das aus einer Schachtvorbohrung am Standort Krasnojarsk entwickelt wurde. Basierend auf dieser lithologischen Schichtabfolge und den damit einhergehenden Kluftsystemen sowie auf Basis der aktuellen Grubengebäudeplanung seitens des Russischen Partners wurde damit begonnen, ein Verfüll- und Verschlusskonzept zu entwickeln.

Sowohl die Einlagerungsbohrlöcher, die Einlagerungsstrecken, die Zugangsstrecken sowie insbesondere die Schächte sollen mit Dichtsystemen versehen werden, die sich möglichst gegenseitig in ihrer Wirkung ergänzen. Grundsätzliche Anforderungen an derartige Dichtsysteme, die von deutscher Seite empfohlen werden, sind:

- die vollständige Verfüllung aller untertägigen Grubenräume,
- die redundante und diversitäre Anordnung von Dichtelementen,
- die vollständige Wartungsfreiheit bei
- möglichst einfache und robuste Konstruktion,
- die gegenseitige Isolierung von Einlagerungsstrecken,

mit dem Ziel, Fluidbewegungen soweit wie möglich zu minimieren, um damit auch eine Ausbreitung von Radionukliden signifikant zu verzögern.

Im Berichtszeitraum wurde damit begonnen, Module für Dichtsysteme zu selektieren inklusive der entsprechenden Materialien.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführende Arbeiten zur Entwicklung eines Verfüll- und Verschlusskonzeptes auf Basis der aktuellen Grubengebäudeplanung, seitens des Russischen Partners VNIPI PT sowie dem lithologischen Schachtprofil, das aus einer Schachtvorbohrung gewonnen wurde.

Termingerechte Erstellung eines gemeinsamen Abschlussberichtes zu diesem Verbundvorhaben.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M., Flügge, J., Hammer, J., Krone, J., Kühnlentz, T., Meleshyn, A., Wolf, J. (2014): Site-specific evaluation of safety issues for high-level waste disposal in crystalline rock, Technical Report, DBE TECHNOLOGY, BGR, GRS, Peine, Hannover, Braunschweig.

Zuwendungsempfänger: Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 10810
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 30.09.2016		Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 632.854,00 EUR		Projektleiter: Dr. Hampel

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" (Laufzeit: 01.08.2007 bis 31.07.2010) fort.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund steht dabei nun das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung und Verheilung. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger koordiniert das Vorhaben und betreut die Kooperation mit den Sandia National Laboratories. Er beteiligt sich an dem Stoffgesetzvergleich im Teilvorhaben 1 mit dem von ihm entwickelten Composite-Dilatanz-Modell (CDM) und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D (Itasca).

Im Berichtszeitraum führte der Zuwendungsempfänger neue Berechnungen zum Steinsalzverhalten in der Umgebung des Dammjochs in einer 700 m tiefen Strecke der Schachanlage Asse II durch und erstellte einen umfangreichen und detaillierten Vergleich der Ergebnisse der Projektpartner. Die Arbeiten und Ergebnisse präsentierte er auf dem 5th US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation am 08.-10.09.2014 in Santa Fe, NM, USA sowie auf dem 11. Projektstatusgespräch des PTKA-WTE am 25.11.2014 im KIT Karlsruhe und erstellte dazu eine Veröffentlichung für die Proceedings der SALT MECH 8-Konferenz im Mai 2015 in Rapid City, SD, USA.

Außerdem führte er umfangreiche Nachrechnungen der Laborversuche mit clean salt aus der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) in New Mexico (USA) fort und bestimmte für sein CDM-Stoffgesetz einen salztypspezifischen Parameterkennwertsatz, mit dem Berechnungen der Untertagestrukturen „Room D“ in der WIPP erfolgen werden.

Ferner führte der Zuwendungsempfänger gemeinsam mit den Partnern den 14. und 15. Projektworkshop am 21.-22.07. und 29.-30.10.2014 in der TU Clausthal durch.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird mit seinem Stoffgesetz CDM zahlreiche Kriech- und Festigkeits-Laborversuche der TUC mit argillaceous salt aus der WIPP nachrechnen und dabei auch für diesen Salztyp einen einheitlichen Kennwertsatz bestimmen. Mit den ermittelten Kennwerten für clean salt und argillaceous salt wird er die geplanten Benchmark-Berechnungen des „Room D“ und „Room B“ aus der WIPP durchführen.

Die Arbeiten des Verbundes und die aktuelle Version des CDM-Stoffgesetzes wird der Zuwendungsempfänger auf der SALT MECH 8-Konferenz im Mai 2015 in Rapid City, SD, USA präsentieren. Außerdem wird er mit den Partnern den 16. und 17. Projektworkshop am 10.-11.02.2015 im IfG Leipzig und am 30.05.2015 in Rapid City durchführen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Literatur zum CDM-Stoffgesetz und zum aktuellen Verbundprojekt:

A. Hampel (2012): The CDM constitutive model for the mechanical behavior of rock salt: Recent developments and extensions. In: P. Bérest, M. Ghoreychi, F. Hadj-Hassen & M. Tijani (Hrsg.): Proceedings of the 7th Conference on the Mechanical Behavior of Salt, Paris, 16.-19. April 2012. S. 45-55. CRC Press/Balkema, Leiden NL.

A. Hampel, J.G. Argüello, F.D. Hansen, R.M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, K.-H. Lux, K. Herchen, U. Düsterloh, A. Pudewills, S. Yildirim, K. Staudtmeister, R. Rokahr, D. Zapf, A. Gährken, C. Missal & J. Stahlmann (2013): Benchmark Calculations of the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt – Results from a US-German Joint Project. In: Proceedings of the 47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium, San Francisco, CA, USA, 23.-26. Juni 2013. American Rock Mechanics Association (ARMA).

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 10820
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 791.203,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" (Laufzeit: 01.08.2007 bis 31.07.2010) fort.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffmodell und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung an realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund stehen dabei nunmehr das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung (Verheilung) von Steinsalz. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffmodellfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum führten die Projektpartner am 21./22. Juli 2014 sowie am 30./31. Oktober 2014 in Clausthal-Zellerfeld (veranstaltet vom Zuwendungsempfänger) jeweils einen Projekt-Workshop durch. Auf dem ersten Projekt-Workshop in Clausthal-Zellerfeld wurden von den Projektpartnern modifizierte numerische Simulationsergebnisse zur Situation „Dammjoch“ verglichen und diskutiert. Hierfür stellte der Zuwendungsempfänger die Daten zuvor an ausgewählten Berechnungsmodellpunkten zusammen und sandte diese dem Projektkoordinator zu. Darüber hinaus präsentierte der Zuwendungsempfänger auf diesem Workshop Laborergebnisse von durchgeführten Versuchen an tonhaltigem Steinsalz der Lokation WIPP-site (New Mexico/USA). Dabei handelte es sich um Festigkeitsversuche mit reduzierter Belastungsgeschwindigkeit sowie Kriechversuche mit Schädigungsentwicklung.

Auf dem zweiten Projektworkshop präsentierte der Zuwendungsempfänger die Ermittlung von lokationsspezifischen Parametern für das Stoffmodell Lux-Wolters und Nachrechnungen der Kriechversuche an reinem sowie tonhaltigem Steinsalz aus der WIPP-site. Damit sind für beide Steinsalztypen einheitliche Parametersätze erarbeitet worden. Des Weiteren wurden mit diesen Parametersätzen erste numerische Berechnungen für die Untertagesituation „Room D“ der WIPP-site durchgeführt und die Ergebnisse mit einem In-situ-Messwertvergleich auf dem Workshop vorgestellt.

Zusätzlich hat der Zuwendungsempfänger im Berichtszeitraum Modifikationen an seinem Stoffmodell erarbeitet und die Neuerungen validiert.

Das vorgesehene laborative Untersuchungsprogramm am WIPP-Salz wurde im 2. Halbjahr 2014 erfolgreich abgeschlossen. Die restlichen noch nicht übermittelten Versuchsdaten werden aufbereitet und den Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird die Berechnungsergebnisse zur Situation „Room D“ überarbeiten und dem Projektkoordinator für einen Ergebnisvergleich zwischen den Projektpartnern übermitteln.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Der Zuwendungsempfänger wird die Laborergebnisse an Steinsalz der Lokation WIPP-site auf der Konferenz SALT MECH 8 in Rapid City/USA im Mai 2015 vorstellen. Das Abstract wurde akzeptiert und das Paper eingereicht.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 10830
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016		Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 977.150,00 EUR		Projektleiter: Dr. Salzer

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" fort. Im März 2013 erfolgte eine Verlängerung für die WIPP-site-spezifischen Untersuchungen.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund steht dabei nun das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung (Verheilung). Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum führten die Partner am 21./22. Juli und 29./30. Oktober in Clausthal jeweils einen Projekt-Workshop durch. Auf den Workshops wurden Berechnungsergebnisse zu den gemeinsam vereinbarten und von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen vorgestellt und besprochen. Außerdem wurden Labor- und In-situ-Daten sowie Modellansätze zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz diskutiert und die Rahmenbedingungen für weitere Modellberechnungen gemeinsam festgelegt.

Das vorliegende Teilvorhaben 3 beteiligt sich mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach Minkley und dem Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz nach Günther/Salzer am Stoffgesetzvergleich. Dabei wird das Programm FLAC3D (Fa. Itasca) verwendet. Außerdem ist das IfG maßgeblich an der Planung und Durchführung der Laborversuche zur Ableitung der Stoffmodellparameter beteiligt und führt ergänzende Messungen am Dammjoch durch.

Das IfG hat den 14. und 15. Projekt-Workshop gemeinsam mit den Partnern am 21. und 22. Juli bzw. am 29. und 30. Oktober an der TU Clausthal vorbereitet und durchgeführt. Auf den Workshops wurden die Ergebnisse der bisherigen Arbeiten sowie der Zusammenarbeit mit Sandia National Laboratories, insbesondere die Fortschritte bei der Realisierung des geplanten Laborprogramms an den von Sandia National Laboratories zur Verfügung gestellten Großlochbohrkernen aus der WIPP-site vorgestellt und diskutiert. Diese Laborversuche schaffen die Voraussetzung für die Durchführung der in der Verlängerungsphase geplanten Benchmark-Berechnungen für Room B und D in der WIPP-site mit bzw. ohne Erhitzer.

Im Berichtszeitraum hat das IfG auch die geplanten triaxialen Kriechversuche bei unterschiedlichen Manteldrücken und Temperaturen (bei 25 °C, 60 °C und 80 °C) am sogenannten „argillaceous salt“ der WIPP-site vollständig abgeschlossen. Das gleiche gilt für die Prüfkörperherstellung, wobei bis Ende Oktober 77 große Prüfkörper und 4 komplette Großkerne aus dem „argillaceous salt“ der WIPP-site der TU Clausthal übergeben worden sind.

Im zweiten Halbjahr 2014 wurden durch das IfG zusätzliche Untertagemessungen zur Bestimmung des Einspannungszustandes und der Dilatanz in Firste, Ulme und Sohle der Zugangsstrecke (Valberger Strecke) ca. 10 m vor dem Dammjoch durchgeführt, ausgewertet und ein erster Vergleich mit den Modellierungsergebnissen vorgestellt.

Außerdem hat das IfG die Nachrechnungen zum Dammjoch mit beiden Stoffmodellen sowie der Laborversuche am „clean salt“ mit dem Günther/Salzer Modell weitgehend abgeschlossen und einen einheitlichen Eingabe-file für die Modellierung von Room D für alle Projektpartner erarbeitet und übergeben.

Auf dem 5th US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation (Sept. 7-11, 2014 in Santa Fe, NM) wurde vom IfG ein Vortrag zu den Ergebnissen der Laborversuche an WIPP-salt („clean salt“) gehalten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2015 werden weitere Untertagemessungen zur Bestimmung des Einspannungszustandes und der Dilatanz im mittleren Bereich des Dammjoches zum Vergleich mit den Modellierungsergebnissen unter Berücksichtigung der Verheilung durchgeführt.

Außerdem sind weitere Verbesserungen bei der Nachrechnung der Laborversuche mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell am WIPP-salt sowie der Beginn der Nachrechnungen für die Erhitzerversuche im Room B sowie für die ungestörten Ergebnisse aus Room D geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zu den IfG-Stoffgesetzen:

GÜNTHER, R.-M., SALZER, K., POPP, T. & LÜDELING, C. (2014): Steady state-creep of rock salt - Improved Approaches for Lab Determination and Modeling to describe transient, stationary and accelerated creep, dilatancy and healing. Paper prepared for presentation at the 48th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium held in Minneapolis, MN, USA, 1-4 June 2014.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10840
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 302.359,00 EUR	Projektleiter: Pudewills	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" (Laufzeit: 01.08.2007 bis 31.07.2010) fort.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund steht dabei nun das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung (Verheilung). Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden vom Zuwendungsempfänger die neuen Laborversuche mit den beiden WIPP-Salztypen „clean salt“ und „argillaceous salt“ nachgerechnet, um die zugehörigen Parameterkennwerte für die beiden Stoffmodelle zu bestimmen. Im Mittelpunkt dieser Arbeiten stand die Nachrechnung von aktuellen IfG- und TUC-Kriechversuchen am „argillaceous salt“. Mit den ermittelten salztypspezifischen Kennwerten wurden weitere Modellrechnungen des „Room D“ aus der WIPP durchgeführt. Besonderes Augenmerk wurde der Simulation der mittleren Anhydrit-Schicht gewidmet. Zuerst wurde sie als eine Gleitschicht simuliert und dann als Kontaktfläche mit den vorgegebenen Mohr-Coulomb Stoffdaten behandelt.

Weiterhin wurde auf dem 15. Projektworkshop in Clausthal gemeinsam von den Projektpartnern eine recht feine Finite-Element Diskretisierung der „Room D“ Geometrie vereinbart, so dass ein Vergleich der Rechenergebnisse des Programms ADINA mit den Ergebnissen des Programms FLEC-3D möglich ist. Zum Jahresende wurde dieses neue Modell fertig gestellt und einige Berechnungsergebnisse werden auf dem nächsten Projektworkshop im Leipzig vorgestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2015 wird der Zuwendungsempfänger die Nachrechnung der Kriechversuche bei höheren Temperaturen (60 und 100 °C) an beiden WIPP-Steinsalztypen „clean salt“ und „argillaceous salt“ abschließen. Die Berechnung des „Room D“ Modells wird ebenfalls beendet. Auch sollen die vorhandenen Stoffmodelle erweitert werden, um die geplanten thermo-mechanische Vorgänge bei der Untertagestruktur „Room B“ in der WIPP zu simulieren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Pudewills, A. (2011): Numerische Simulation zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz, BMBF - Verbundprojekt 02C1597, Einzelbericht zum Teilprojekt 3, KIT Scientific Reports, KIT-SR 7579.

K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, T. Popp, M. Wiedemann, A. Hampel, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh: Joint projects on the comparison of constitutive models for the mechanical behavior of rock salt: I. Overview of the projects, reference mine for 3-D benchmark calculations, in situ measurements and laboratory tests. In Proc. of the 7th Conf. on the Mechanical Behavior of Salt, Paris, France, 16-19 April 2012, P. Berest, M. Ghoreychi, F. Hadj-Hassen & M. Tijani, (eds), CRC Press, Taylor & Francis Group, London, UK.

A. Hampel, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh: Joint projects on the comparison of constitutive models for the mechanical behavior of rock salt: II. Overview of the models and results of 3D benchmark calculations. In Proc. of the 7th Conf. on the Mechanical Behavior of Salt, Paris, France, 16-19 April 2012, P. Berest, M. Ghoreychi, F. Hadj-Hassen & M. Tijani, (eds.), CRC Press, Taylor & Francis Group, London, UK.

A. Hampel, L. Argüello, F. Hansen, R.-M. Günther, K. Salzer, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh, A. Pudewills, S. Yildirim, R. Rokahr, A. Gährken, C. Missal, J. Stahlmann: Benchmark Calculations of the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt – Results from a US-German Joint Project, 2013. In Proceedings of Proceedings of the 47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium 23-26 June 2013, San Francisco, ISBN: 978-0-894844-0-4.

A. Hampel, R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, S. Yildirim, R. Rokahr, A. Gährken, C. Missal, J. Stahlmann, K. Herchen, K.-H. Lux: Joint Project III on the comparison of constitutive models for the thermo-mechanical behavior of rock salt: I. Overview and results from model calculations of healing of rock salt. Mechanical Behavior of Salt VIII (SALT MECH 8) Conference, Rapid City, SD, USA, May 26-28, 2015 (in print)

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 10850
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016		Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 391.592,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Rokahr

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" (Laufzeit: 01.08.2007 bis 31.07.2010) fort.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund steht dabei nun das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung (Verheilung). Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zum 15. Projektworkshop wurden die Versuchsnachrechnungen zum ASSE-Speisesalz zusammengefasst und mit dem dazu gehörigem Parametersatz vorgestellt. Ebenfalls wurden Versuche zum WIPP-salt nachgerechnet und ein einheitlicher Parametersatz zum WIPP-clean salt und - argillaceous salt erstellt und vorgestellt. Des Weiteren wurden weitere Modellnachrechnungen zur WIPP-site Room D durchgeführt. Hierfür wurde nach Absprache mit den Projektpartnern ein einheitliches Berechnungsmodell gewählt.

Für das Dammjoch-Modell wurden abschließende Berechnungen durchgeführt. Die Ergebnisse wurden vorgestellt und besprochen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Berechnungen zur WIPP-site sollen vorgestellt und mit den Projektpartnern besprochen werden. Anschließend sollen weitere Berechnungen zur WIPP-site folgen. Die Ansätze im Modell sollen hierbei sukzessive den realen Bedingungen angenähert werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Hauck, R. (2001): Tragverhalten tiefliegender Salzkavernen bei atmosphärischem Innendruck
 Hampel, A., O. Schulze, U. Heemann, F. Zetsche, R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, Z. Hou, R. Wolters, U. Düsterloh, D. Zapf, R. Rokahr, A. Pudewills (2007): Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1004-1054), Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Projektträger PTKA-WTE.

Schulze, O., U. Heemann, F. Zetsche, A. Hampel, A. Pudewills, R.-M. Günther, W. Minkley, K. Salzer, Z. Hou, R. Wolters, R. Rokahr & D. Zapf (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, I. Modeling of deformation processes and benchmark calculations.

Hou, Z., R. Wolters, U. Düsterloh, R. Rokahr, D. Zapf, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Pudewills, U. Heemann, O. Schulze, F. Zetsche & A. Hampel (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, II. Numerical modeling of two in situ case studies and comparison.

Leuger, B., Staudtmeister, K., Yildirim, S., Zapf, D. (2010): Modeling of creep mechanism and damage of rock salt. Proceedings of the 7th european conference on numerical methods in geotechnical engineering, T. Benz, St. Nordal, London, UK, S. 89-94.

Hampel, A., R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh (2010): Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1577-1617), Karlsruher Institut für Technologie, Projektträger PTKA-WTE.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 10860
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016		Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 405.066,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Stahlmann

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" (Laufzeit: 01.08.2007 bis 31.07.2010) fort.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund steht dabei nun das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung (Verheilung). Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger beteiligt sich an dem Stoffgesetzvergleich im Teilvorhaben 6 mit dem Stoffmodell für Steinsalz TUBSsalt (vormals als Döring bzw. IGB-TUBS bezeichnet) und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen zurzeit das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D der Fa. Itasca sowie das Finite-Elemente-Programm ANSYS der Fa. ANSYS.

Im Berichtszeitraum konnte die Umstellung der Implementierung von ANSYS Version 13 auf ANSYS Version 15 abgeschlossen werden. FLAC3D wird weiterhin in Version 5.01 eingesetzt.

Auf dem 14. Projektworkshop an der TU Clausthal vom 21. bis 22.07.2014 wurden die Ergebnisse der Dammjoch-Simulation verglichen und diskutiert. Zudem erfolgte eine Abstimmung über das Zugversagen und die Modellbildung für Simulation des Room D in der WIPP. Der 15. Projektworkshop fand vom 29. bis 30.10.2014 ebenfalls an der TU Clausthal statt. Hier wurden die Simulationsergebnisse der Laborversuche vonASSE Speisesalz, WIPP Clean Salt und WIPP Argillaceous Salt vorgestellt. Es konnte gezeigt werden, dass das Stoffmodell auch Relaxationsversuche und Versuche mit einer zyklischen Belastung abbilden kann.

In der Zeit vom 7. bis 11.09.2014 fand der 5. US/German Workshop in Santa Fe, NM, USA statt. Bei diesem Workshop wurde der aktuelle Stand der Arbeiten des Verbundprojektes präsentiert und die zukünftige Zusammenarbeit diskutiert.

Zudem wurde für die gemeinsame Veröffentlichung des Verbundprojektes zur SALT MECH 8 Konferenz im Juni 2015 Zuarbeit für Herrn Hampel geleistet. Auch wurde eine Veröffentlichung zum aktuellen Stand des Stoffmodells TUBSsalt dort eingereicht und angenommen.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Zeit liegt der Schwerpunkt der Arbeiten auf der Modellbildung und Simulation von Room D und Room B der WIPP. Dazu werden noch weitere Abstimmungen insbesondere zur Nachbildung der Erhitzer bzw. der Wärmelast erforderlich. Zudem ist geplant, einen Projektworkshop im Zuge der SALT MECH 8 in Rapid City, SD, USA abzuhalten, um den engen Austausch mit SANDIA National Laboratories fortzuführen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Stahlmann, J.; Missal, C. (2010): Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz. Poster. 31. Baugrundtagung 3. bis 6. November 2010, München

Hampel, A.; Argüello, J.G.; Hansen, F.D.; Günther, R.M.; Salzer, K.; Minkley, W.; Lux, K.-H.; Herchen, K.; Düsterloh, U.; Pudewills, A.; Yildirim, S.; Staudtmeister, K.; Rokahr, R.; Zapf, D.; Gährken, A.; Missal, C.; Stahlmann, J. (2013): Benchmark Calculations of the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt – Results from a US-German Joint Project. 47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium, 23.-26.06.2013, San Francisco, CA, USA

Missal, C.; Döring, I.; Stahlmann, J. (2014): Comparison of Triaxial Strength Tests of Clean Halite and Argillaceous Halite from the WIPP. 48th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium, 01.-04.06.2014, Minneapolis, MN, USA

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 10880
Vorhabensbezeichnung: Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2010 bis 30.09.2014	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 30.09.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 519.570,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Voigt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit diesem Forschungsvorhaben sollen die Wissenslücken im Bereich des MgO-Baustoffs als potentiell, langzeitstabiles Material zur Errichtung von geotechnischen Barrieren im Salinar geschlossen werden. Ein geschlossenes Gesamtbild zu den kausalen Zusammenhängen zwischen Bindemittelphasenbildung und mechanischen Eigenschaften soll erarbeitet werden. Dazu gehört die Klassifizierung von MgO-Typen für entsprechende Auswahlkriterien für den Einsatz je nach Anforderung an den Baustoff.

Es werden die temperaturabhängigen Phasengleichgewichte (=Bindemittelphase) im Grundsystem MgO-MgCl₂-H₂O von 25 °C bis 120 °C bestimmt. Damit soll die eindeutige Identifikation der beim Abbinden des Sorelsystems entstehenden Phasen im Zusammenhang mit den jeweiligen Bildungsbedingungen und den sich daraus entwickelnden mechanischen Eigenschaften möglich sein. Der Zusammenhang zwischen Phasenbildung, technologischer Verarbeitbarkeit, möglicher Entwicklung eines Expansionsdruckes und Endfestigkeit soll dabei sichtbar gemacht werden.

Über das Grundsystem hinaus werden für reale Baustoffsysteme die Untersuchungen auf das System MgO-CaCl₂/MgCl₂-H₂O und MgO-MgSO₄-H₂O erweitert. Für das System MgO-MgSO₄-H₂O sollen die temperaturabhängigen Phasengleichgewichte bestimmt werden, um in Kombination mit dem Grundsystem auf mögliche Mischphasen im Bindersystem unter Einfluss von Sulfat-haltigen Lösungen schließen zu können. Aus den gewonnenen temperaturabhängigen Löslichkeitsdaten der genannten Systeme können Parameter abgeleitet werden, welche thermodynamische und geochemische Modellierungen der Wechselwirkungen mit den Komponenten des hexären Systems der ozeanischen Salze für übergreifende Anwendungen ermöglichen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Phasenbildung im Grundsystem Mg(OH)₂-MgCl₂-H₂O bei erhöhten Temperaturen (40 °C, 60 °C, 80 °C, 100 °C, 120 °C)
- AP2: Einfluss von Sulfat und Natriumchlorid auf die Sorelphasenbildung
- AP3: Schlussfolgerungen für die Rezepturentwicklung
- AP4: Expansionsdruck von Sorelphasen
- AP5: Vorschlag für In-situ-Versuch

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Berichtserfassung für AP1 und AP2:

Messungen zum Druckverhalten und Phasenbestandsentwicklung nach sekundärem Lösungszutritt beider Rezepturen (C3, D4) wurden abgeschlossen. Alle Probekörper wurden aus den Messzellen ausgebaut und röntgenographisch an der Oberfläche vermessen. Im Fall der D4 (5-1-8 Phase) Rezeptur ist der registrierte Druckanstieg auf die Kristallisation der 3-1-8 Phase zurückzuführen. Zur Phasenanalyse des Probekörperinneren und zur Analyse der Eindringtiefe der Zutrittslösung wurden die Probekörper für weitere Messungen zersägt. In Verbindung mit der Berichtserfassung für alle weiteren Arbeitspakete (AP3, AP4 und AP5) erfolgt derzeit noch die Auswertung dieser letzten Messungen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Abschlussberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10890
Vorhabensbezeichnung: Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2010 bis 31.10.2014	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.10.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.861.233,00 EUR	Projektleiter: Wieczorek

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen ein leistungsstarkes Instrument zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen bereitgestellt werden. Zu diesem Zweck bietet das Programmpaket innovative Werkzeuge zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager. Die Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und die darauf aufbauende Entwicklung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen ist ein weiteres wesentliches Ziel im Projekt VIRTUS. Das Projekt leistet somit einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen. Insgesamt sollen die Erkenntnisse bei der zeitnahen Entwicklung eines fundierten Sicherheitsnachweises nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation helfen.

Das Vorhaben wird als Gemeinschaftsprojekt von GRS (Projektleitung), BGR und DBE TEC durchgeführt, die Softwareentwicklung übernimmt IFF als Unterauftragnehmer der GRS.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung der Softwareplattform für ein Virtuelles Untertagelabor/Endlagersystem im Steinsalz (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP2: Erstellung, Dokumentation und Pflege der VIRTUS-Datenbank(en) mit Auswertung der vorhandenen Primärliteratur und Erzeugung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für PLC-Simulationen (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP3: Service-orientierte Architektur (GRS (IFF) in Abstimmung mit BGR, DBETEC)
- AP4: Erarbeitung und Modifizierung des geologischen Standortmodells (BGR)
- AP5: Prototypische THMC-Modellierung ausgewählter Experimente zur Strecken- und Bohrlochlagerung bzw. entsprechender HAW-Endlagerkonfigurationen (GRS, BGR, DBETEC)
- AP6: Abschlussbericht und VIRTUS-Präsentation in einer Fachveranstaltung (GRS (IFF), BGR, DBETEC)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die erforderlichen Funktionalitäten zum Import und Export von Modellen und Simulationsergebnissen, zur Aufbereitung von Modellen, zur Generierung und Editierung von Grubengebäuden sowie zur Visualisierung, sind implementiert und getestet. Die Datenbankstruktur ist umgesetzt und in die Softwareplattform integriert. Ein Hot-Spot-Konzept für den intuitiven Zugriff auf die in VIRTUS zugänglichen Informationen wurde entworfen und implementiert. Damit steht ein funktionsfähiger Prototyp der Softwareplattform zur Verfügung.
- AP2: Die Literaturlauswertung wurde für Salzgesteine und EBS-Materialien durchgeführt. Zur Dichte, den thermischen, hydraulischen und mechanischen Parametern der Materialien, wurden Protokolle der Auswertung mit Angabe von best-estimate-Werten angelegt. Die Datenbank ist noch nicht komplett, sie wird mit den ermittelten Werten gefüllt und muss noch getestet werden.
- AP3: Die Client-Server-Struktur ist umgesetzt.
- AP5: Zur Demonstration der VIRTUS-Funktionen zur Visualisierung von Simulationsergebnissen wurden von den Projektpartnern drei prototypische Experimente modelliert. GRS übernahm dabei die gekoppelte thermisch-mechanische Simulation einer aufgeheizten Strecke. Mit Hilfe von VIRTUS wurde das geometrische Modell für die Simulation erstellt und an GiD/CODE_BRIGHT zur Durchführung der Modellrechnungen exportiert. Die Simulation wurde erfolgreich durchgeführt und die Ergebnisse wurden von VIRTUS importiert und dargestellt.
- AP6: VIRTUS wurde beim 5. deutsch-amerikanischen Workshop im September 2014 in Santa Fé und beim 11. Projektstatusgespräch zu BMWi-geförderten FuE-Projekten im November 2014 bei PTKA-WTE in Karlsruhe präsentiert. Der Entwurf des Abschlussberichts liegt vor.

4. Geplante Weiterarbeiten

Es wird angestrebt, die Entwicklung von VIRTUS im Rahmen einer zukünftigen Projektphase weiter voranzutreiben.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., J. Behlau, U. Heemann, S. Masik, C. Müller, M. Raab, E. Kuate Simo (2014): VIRTUS – Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz, Abschlussbericht, GRS-354, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Dezember 2014.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10900
Vorhabensbezeichnung: Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2010 bis 31.10.2014	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.10.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 243.324,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll ein leistungsstarkes Instrument zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager sowie zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen bereit gestellt werden.

Mit der Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und der Ableitung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen leistet das Projekt auch einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen und trägt damit insgesamt zur zeitnahen Entwicklung eines fundierten Safety Case nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation bei.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung der Softwareplattform für ein Virtuelles Untertagelabor/Endlagersystem im Steinsalz (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP2: Erstellung, Dokumentation und Pflege der VIRTUS-Datenbank(en) mit Auswertung der vorhandenen Primärliteratur und Erzeugung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für PLC-Simulationen (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP3: Service-orientierte Architektur (GRS (IFF) in Abstimmung mit BGR, DBETEC)
- AP4: Erarbeitung und Modifizierung des geologischen Standortmodells (BGR)
- AP5: Prototypische THMC-Modellierung ausgewählter Experimente zur Strecken- und Bohrlochlagerung bzw. entsprechender HAW-Endlagerkonfigurationen (GRS, BGR, DBETEC)
- AP6: Abschlussbericht und VIRTUS-Präsentation in einer Fachveranstaltung (GRS (IFF), BGR, DBETEC)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1.4: VIRTUS ist als Hilfsmittel sowohl für die Forschung in einem beliebigen Untertagelabor als auch für die Umsetzung und Genehmigung eines potentiellen Endlagerstandortes konzipiert. Zu diesem Zweck bietet VIRTUS verschiedene Funktionalitäten zum Import und Aufbereitung geologischer Modelle, zur Generierung und Bearbeitung von untertägigen Hohlräumen, zur Verschneidung von geologischem Grubenmodell zu einem kombinierten Oberflächenmodell, zur Definition und zum Export von Modellausschnitten und Materialdaten an Berechnungscodes, zum Import und zur Visualisierung von Simulationsergebnissen sowie zum Zugriff auf die in VIRTUS zugänglichen Informationen mittels eines sog. Hot-Spot-Konzeptes. Die genannten Funktionalitäten sind implementiert und ein funktionsfähiger Prototyp der Softwareplattform steht zur Verfügung.
- AP2: Das AP sieht die Erstellung einer VIRTUS-Datenbank vor, die Informationen über wichtige Modellierungsparameter enthält und somit als Datenbasis für Berechnungscodes dienen soll. Die Literaturobwertung wurde für Salzgesteine und EBS-Materialien durchgeführt. Es wurden entsprechende Auswerteprotokolle erstellt und ein xml-basiertes Datenbanksystem in VIRTUS integriert. Allerdings ist die Datenbank noch nicht komplett mit den ausgewerteten Parametern gefüllt und auf ihren praktischen Einsatz hin getestet.
- AP5: Zur Demonstration des Funktionsumfanges von VIRTUS war jeder Projektpartner mit der Modellierung eines exemplarischen Experimentes beauftragt. Die DBE TECHNOLOGY GmbH führte thermische Berechnungen eines Feldes von Einlagerungsbohrlöchern zur Illustration der Wärmeausbreitung durch. Die Berechnungen mit einem Einlagerungsfeld aus sieben Bohrlöchern wurden abgeschlossen und die Ergebnisse dieser Berechnung erfolgreich in VIRTUS importiert.
- AP6: Der Abschlussbericht wurde dem Projektträger übermittelt. Des Weiteren wurde VIRTUS im Rahmen des 11. Projektstatusgespräches zu BMWi geförderten FuE-Projekten im November 2014 bei PTKA-WTE in Karlsruhe der Öffentlichkeit vorgestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., Behlau, J., Heemann, U., Masik, S., Müller, C., Raab, M. & Kuate Simo, E. (2014): Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz, Abschlussbericht, GRS-354, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Dezember 2014.

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 10910
Vorhabensbezeichnung: Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2010 bis 31.10.2014	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.10.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 372.697,00 EUR	Projektleiter: Behlau	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen ein leistungsstarkes Instrument zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen bereitgestellt werden. Zu diesem Zweck bietet das Programmpaket innovative Werkzeuge zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager. Die Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und die darauf aufbauende Entwicklung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen ist ein weiteres wesentliches Ziel im Projekt VIRTUS. Das Projekt leistet somit einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen. Insgesamt sollen die Erkenntnisse bei der zeitnahen Entwicklung eines fundierten Sicherheitsnachweises nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation helfen.

Das Vorhaben wird als Gemeinschaftsprojekt von GRS (Projektleitung), BGR und DBE TEC durchgeführt, die Softwareentwicklung übernimmt IFF als Unterauftragnehmer der GRS.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung der Softwareplattform für ein Virtuelles Untertagelabor/Endlagersystem im Steinsalz (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP2: Erstellung, Dokumentation und Pflege der VIRTUS-Datenbank(en) mit Auswertung der vorhandenen Primärliteratur und Erzeugung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für PLC-Simulationen (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP3: Service-orientierte Architektur (GRS (IFF) in Abstimmung mit BGR, DBETEC)
- AP4: Erarbeitung und Modifizierung des geologischen Standortmodells (BGR)
- AP5: Prototypische THMC-Modellierung ausgewählter Experimente zur Strecken- und Bohrlochlagerung bzw. entsprechender HAW-Endlagerkonfigurationen (GRS, BGR, DBETEC)
- AP6: Abschlussbericht und VIRTUS-Präsentation in einer Fachveranstaltung (GRS (IFF), BGR, DBETEC)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Arbeiten zur Umsetzung der VIRTUS-Schnittstelle (XML) sind seitens BGR abgeschlossen. Der Abschlussbericht enthält die vollständigen XML-Schnittstellendefinition. Das gemeinsam erarbeitete Hot-Spot-Konzept ist softwaretechnisch umgesetzt und in der VIRTUS-Umgebung arbeitsfähig.
- AP2: Die Arbeiten an der Datenbank sind für eine exemplarische Version abgeschlossen. Für den gekoppelten Betrieb an der VIRTUS-Software ist die Compilierung der Datenbank abgeschlossen. Die Zusammenfassungen zu den vier BEW-Protokollen zu den elastischen Eigenschaften von Steinsalz, seinen stationären Kriechparametern sowie zur Dilatanz und den daraus resultierenden Permeabilitäten im Steinsalz, sind im Abschlussbericht beschrieben.
- AP4: Die Arbeiten sind abgeschlossen.
- AP5: Die Arbeiten zur prototypischen Modellierung des BGR-Experiments „Streckenkonvergenz mit detaillierter Geologie“ unter Einhaltung des VIRTUS-Workflows sind abgeschlossen. Die Vernetzung erfolgte mit einer BGR-eigenen Version des Netzgenerators TetGen. Die Ergebnisse konnten über die Schnittstellenspezifikation zur binären Ergebnisdatei an VIRTUS zurückgegeben und dort visualisiert werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., J. Behlau, U. Heemann, S. Masik, C. Müller, M. Raab, E. Kuate Simo (2014): VIRTUS – Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz, Abschlussbericht, GRS-354, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Dezember 2014.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10941
Vorhabensbezeichnung: Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2011 bis 31.10.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.297.575,00 EUR	Projektleiter: Dr. Becker	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Sensitivitätsanalyse stellt einen wesentlichen Bestandteil der Modellrechnungen zur Langzeitsicherheit eines Endlagers dar. Die dafür bislang eingesetzten Verfahren liefern bei komplexen Endlagermodellen jedoch nur bedingt aussagekräftige Ergebnisse. Moderne Methoden, die genauere und verlässlichere Informationen liefern können, sollen im Hinblick auf Endlagermodelle vergleichend getestet und ggf. gezielt angepasst werden. Am Ende des Vorhabens soll eine Vorgehensempfehlung zur Durchführung globaler Sensitivitätsanalysen bei Modellrechnungen zur Langzeitsicherheit von Endlagern in unterschiedlichen Wirtsformationen gegeben werden.

Im Vorhaben kommen die parallel im Projekt ADEMOS entwickelten statistischen Programmkomponenten zum Einsatz. Bezüglich der Testfälle wird auf Modelle zurückgegriffen, die in den Projekten ISIBEL und GENESIS/ERATO entwickelt wurden bzw. werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Methoden der globalen Sensitivitätsanalyse:

Es ist ein ausführlicher Überblick über die Methoden der globalen Sensitivitätsanalyse sowie die Verfahren zur Stichprobenziehung zu erarbeiten. Die Methoden werden klassifiziert und hinsichtlich ihrer Eignung für den Einsatz im Rahmen von Sicherheitsnachweisen für Endlager bewertet. Laufende Aktivitäten und Entwicklungen im internationalen Bereich werden verfolgt und ausgewertet.

AP2: Definition von Testfällen:

Es sind mehrere Testmodelle und -szenarien zu definieren, anhand derer die verschiedenen Methoden getestet und verglichen werden können. Es sollen vorrangig Modelle für Salz- und Tonformationen betrachtet werden.

AP3: Durchführung und Auswertung von Testrechnungen:

Die im AP1 identifizierten Methoden der Sensitivitätsanalyse werden auf die Testfälle angewandt, soweit dies nach theoretischen Überlegungen sinnvoll erscheint.

AP4: Anpassung von Methoden und Bereitstellung für die Anwendung:

Aufgrund von Ergebnissen der Arbeitspakete 1 und 3 werden diejenigen Methoden identifiziert und ggf. weiterentwickelt, die für die Anwendung bei der Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern besonders geeignet erscheinen.

Die folgenden Arbeitspakete wurden zum 01.10.2014 neu definiert:

AP5: Verfolgung und Bewertung laufender Entwicklungen: Um sinnvolle, dem Stand von Wissenschaft und Technik entsprechende Sensitivitätsanalysen für Modelle für Endlagersysteme durchführen zu können, ist es notwendig, den sich ständig weiterentwickelnden Stand zu verfolgen und neue Erkenntnisse hinsichtlich ihrer Verwertbarkeit für den Anwendungsfall zu bewerten und zu dokumentieren. Dies geschieht durch Literatursauswertung sowie Teilnahme an Fachkonferenzen.

AP6: Identifikation und Test von Methoden zur probabilistischen Sensitivitätsanalyse: Methoden, die für die Analyse stark nichtlinearer Modelle mit über weite Bereiche gestreuten Ausgabegrößen beson-

ders geeignet erscheinen, werden identifiziert und anhand der bereits definierten oder weiterer Testfälle ausführlich untersucht.

AP7: Internationale Zusammenarbeit: Im Rahmen des Projekts wird ein internationaler Austausch mit Organisationen in Europa und den USA gepflegt, die an ähnlichen Fragestellungen arbeiten.

AP8: Dokumentation: Während der Projektlaufzeit sollen die Ergebnisse in Form von Veröffentlichungen und Konferenzbeiträgen dokumentiert werden. Zum Ende wird ein ausführlicher Gesamt-Abschlussbericht erstellt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1-AP4: Die im ursprünglich geplanten Projektumfang vorgesehenen Arbeiten, abgesehen von der Abschlussdokumentation, wurden im Berichtszeitraum weitgehend abgeschlossen. Die Bearbeitung des Unterauftrags hat sich seitens des Auftragnehmers um einige Monate verzögert, bisher liegt nur eine vorläufige Version des zu entwickelnden Programms vor, mit der einige Tests erfolgreich ausgeführt wurden. Ein Treffen mit dem Auftragnehmer hat stattgefunden. Die Arbeit aus dem Parallelprojekt NUMSA der TU Clausthal konnte noch nicht ausgewertet werden, da sie bislang nicht in abschließend dokumentierter Form vorliegt.

AP6: Es wurden einige Untersuchungen mit problemspezifisch angepassten Verfahren zur Sensitivitätsanalyse durchgeführt. Ein verfolgter Ansatz besteht in der Separation der Stichprobe in durch die Modellausgabe definierte Teilmengen, wodurch ggf. spezifische Sensitivitäten erkennbar werden können. Mit dem Institut für Wissenschaftliches Rechnen der TU Braunschweig wurden die Möglichkeiten einer Metamodellierung diskutiert und eine diesbezügliche Zusammenarbeit vereinbart.

AP7: Auf dem IGD-TP Exchange Forum in Kalmar, Schweden, wurde eine Sitzung zum Thema „Handling of Uncertainties“ veranstaltet, bei der auch Ergebnisse von MOSEL vorgestellt wurden. Im Rahmen der bereits existierenden und dort weiter etablierten Arbeitsgruppe sollen Arbeiten, unter anderem zur Sensitivitätsanalyse, koordiniert und ggf. ein zukünftiges EU-Projekt vorbereitet werden.

Das Projekt wurde auf dem 2014 US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation in Santa Fe, NM, USA, vorgestellt. Hierbei wurde auch eine weitere Kooperation mit Sandia National Laboratories vereinbart.

Mit dem Joint Research Center der EU in Ispra, Italien, wurde ein Erfahrungsaustausch durchgeführt.

AP8: Da das Projekt weitergeführt wird, wird anstelle des Abschlussberichts ein Zwischenbericht erarbeitet. Hiermit wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Neben der weiter laufenden Verfolgung aktueller Entwicklungen im AP5 sollen im Rahmen von AP6 insbesondere Untersuchungen mit einem vereinfachten Metamodell durchgeführt werden, das in Zusammenarbeit mit dem Institut für Wissenschaftliches Rechnen zu erstellen ist. Hierbei ist zu prüfen, inwieweit ein solches, vom eigentlichen Rechenmodell unabhängiges, jedoch numerisch effektiveres Metamodell die originalen Sensitivitäten korrekt abzubilden imstande ist. Weiterhin werden die Untersuchungen mit separierter Stichprobe fortgesetzt. Es ist geplant, diese Untersuchungen im Rahmen einer Fachsitzung auf der European Geosciences Union (EGU) General Assembly in Wien vorzustellen.

Im AP7 soll die internationale Zusammenarbeit auf dem Gebiet des Umgangs mit Unsicherheiten im Safety Case weiter aktiv vorangetrieben werden. Ein Fachtreffen interessierter Partner wird voraussichtlich im Juni stattfinden.

Im Rahmen von AP8 wird der Zwischenbericht fertig gestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Spießl, S. and Becker, D.-A.: Sensitivity Analysis of a Final Repository Model with Quasi-Discrete Behaviour Using Quasi-Random Sampling and a Metamodel Approach in Comparison to Other Variance-Based Techniques. Reliability Engineering & System Safety, Volume 134, February 2015, Pages 287–296

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10951	
Vorhabensbezeichnung: Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA			
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung			
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2011 bis 31.05.2015		Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 804.550,00 EUR		Projektleiter: Dr. Flügge	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Projekt DIKOSA soll die Abhängigkeit des Porendiffusionskoeffizienten von der Porosität von Salzgrus experimentell mit Hilfe von sogenannten „through-diffusion“-Experimenten untersucht werden. Die Experimente werden zur Bestimmung der Gesetzmäßigkeit der Abhängigkeit bei unterschiedlicher Porosität des Salzgruses und mit unterschiedlichen Tracern durchgeführt. Die experimentell ermittelte Abhängigkeit soll in das Nahfeldmodul LOPOS für langzeitsicherheitsanalytische Rechnungen für Endlager im Salz implementiert und die Auswirkungen auf den Radionuklidtransport aus dem Endlager gezeigt werden. Dazu soll eine existierende sicherheitsanalytische Rechnung aus dem Projekt ISIBEL unter Berücksichtigung der verbesserten Beschreibung der Diffusion wiederholt werden.

Neben der direkten Bestimmung der Abhängigkeit des effektiven Porendiffusionskoeffizienten von der Porosität des Salzgruses lassen sich durch die durchgeführten Experimente auch Rückschlüsse auf die Struktur des Porenraumes im kompaktierten Salzgrus ziehen, wie z. B. auf dessen Porenraumvernetzung, d. h. auf das Vorhandensein oder Nichtvorhandensein von unverbundenen Poren. Diese Informationen liefern einen wichtigen Beitrag zur Klärung der Fragestellung, ob die Kompaktion von Salzgrus in den Zugangsstrecken des Endlagers das Transportpotenzial für Lösung und Schadstoffe im Salzgrus herabsetzt und eine potenzielle Freisetzung von Radionukliden verringert.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Planung, Durchführung und Auswertung der Diffusionsexperimente
- AP2: Integration der Ergebnisse in das langzeitsicherheitsanalytische Modell LOPOS (Implementierung in LOPOS und illustrative Rechnungen)
- AP3: Projektleitung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Der im ersten Halbjahr 2014 begonnene Diffusionsversuch am Probekörper Gorleben-8 wurde am 01.09.14 abgebrochen, da kein Tracerdurchbruch zu verzeichnen war. Der Probekörper wurde danach mit tracerfreier, gesättigter Salzlauge gespült, um ihn für einen erneuten Einsatz in Diffusionsversuchen vorzubereiten, und seine Laugenpermeabilität bestimmt. Der Versuch wurde am 24.11.14 erneut gestartet. Um eine möglichst hohe Konzentration von Cäsium einsetzen zu können und um sicherzustellen, dass keine Wechselwirkungen zwischen den Tracern auftreten, wurde nur noch Cäsium in einer Konzentration von $1 \cdot 10^{-2}$ mol l⁻¹ verwendet. Zur Vergleichbarkeit der Diffusionsversuche wird in allen weiteren Versuchen ebenfalls nur noch Cs eingesetzt. Nach Auskristallisation von Salz in einer der Zulaufbohrungen innerhalb der Zelle musste diese am 17.12.14 geöffnet und die Wegsamkeiten von Salzkristallen befreit werden. Bis Ende des Jahres 2014 wurde der Versuch kontinuierlich fortgeführt.

Der Diffusionsversuch Gorleben-9 wurde am 12.08.14 begonnen. Es zeigten sich bereits ab dem 17.08.14 deutliche Unregelmäßigkeiten beim Durchströmen der Reservoirs, so dass der Versuch am 01.09.14 abgebrochen wurde. Eine erneute Bestimmung der Laugenpermeabilität zeigte eine starke Erhöhung und deutet auf deutliche Veränderungen innerhalb des Probekörpers hin. Ein weiterer Einsatz der Probe wurde verworfen. Die Zelle wird im Folgenden zur besseren Durchströmung der Reservoirs auf Bohrungsinwenddurchmesser von $\frac{1}{4}$ “ umgerüstet. Zwei weitere Probekörper Gorleben-10 und Gorleben-11 wurden bis zu einer Porosität von ca. 4 % kompaktiert, aufgesättigt und ihre Permeabilität bestimmt. Die Diffusionsversuche werden voraussichtlich Anfang 2015 beginnen. Im Hinblick auf die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse von Versuch Gorleben-8 wurde ein weiterer Versuchskörper mit ca. 2 % Porosität kompaktiert (Gorleben-12).

Die Ortsverteilung der Tracer im Probekörper Gorleben-6 wurde erneut analysiert. Dazu wurde der Probekörper in zwei Hälften und dann entlang seiner Länge in acht Scheiben zerteilt. Diese wurden auf den Gehalt der eingesetzten Tracer untersucht. Die Ergebnisse bestätigen die Befunde aus der letzten Analyse: Es konnten nur Cs und Nd nachgewiesen werden. Es zeigte sich erneut kein klarer Trend im Konzentrationsverlauf über die Länge der Probe.

AP2:

Mögliche Umsetzungen zur Integration der Ergebnisse in LOPOS wurden identifiziert. Sobald Ergebnisse aus AP1 vorliegen, wird die Abhängigkeit des Diffusionskoeffizienten von der Porosität umgesetzt, allerdings nicht elementspezifisch. Als Testfall wird der deterministische Referenzfall aus dem Projekt ISIBEL-2 herangezogen, weil er wesentliche Anforderungen erfüllt und diverse Erfahrungen nebst Vergleichsergebnissen bereits vorliegen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Fortsetzung bzw. Beginn und Durchführung der Versuche Gorleben-8 bis Gorleben-12, Analyse der gewonnenen Proben, Auswertung der Ergebnisse
 Kompaktion von zwei weiteren Probekörpern mit ca. 1 % Porosität, Vorbereitung und Beginn der Diffusionsversuche
 Anpassung der Versuchsbedingungen: Erweiterung der inneren Bohrungen der Zelle und der Verschraubungen auf $\frac{1}{4}$ “

AP2: Weiterführung der Arbeiten zur Integration der Ergebnisse in das Modell LOPOS

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10961
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 827.932,00 EUR	Projektleiter: Dr. Marquardt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Untersucht werden relevante geochemische Aspekte der Rückhaltung von Np, Pu, Am und Cm im Tongestein. Die Schwerpunkte werden auf Untersuchungen der Sorption, Diffusion, Komplexierung und Redoxprozesse von Actiniden bei höheren Ionenstärken und Temperaturen liegen. Als Tongestein werden der natürliche Opalinuston, der natürliche Callovo-Oxfordian-Ton und das reine Tonmineral Illit untersucht. Zusätzlich werden Aspekte des Einflusses von mobiler Tonorganik und Behälterkorrosionsprodukten auf die Sorption und Diffusion einbezogen. Neben den Diffusionsversuchen mit Actiniden werden Diffusionsversuche mit Tonorganik durchgeführt. Daran gekoppelt sind Untersuchungen zur Stabilität von kolloidaler Tonorganik bei höheren Ionenstärken. Die Komplexierung von Np(V) mit niedermolekularen organischen Komponenten (LWOC) wird ebenfalls bei höheren Ionenstärken und höheren Temperaturen bis 90 °C untersucht. Weiterhin wird die Relevanz von Fe-Mineralphasen aus der Behälterkorrosion für eine Rückhaltung in einigen Sorptionsuntersuchungen geklärt werden. Zusammenarbeiten laufen mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, der Universität Mainz, Potsdam, Heidelberg, Köln, Universität des Saarlandes sowie der TU München.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Sorptionsuntersuchungen: Cm(III)/Eu(III), Np(V), Pu(V) auf Opalinuston, Illite und Eisenphasen: Ionenstärkeabhängigkeit und Temperaturabhängigkeit, Einfluss von Tonorganik.
- AP2: Diffusionsuntersuchungen: Cm(III)/Eu(III) (eventuell Np(IV, V), Pu(IV, V)), ³H-markierter Fulvinsäure mit kompaktiertem Illit.
- AP3: Komplexierungsuntersuchungen: Np(V) mit LWOC (Propionat, Lactat, Kerogen und Huminstoffen) bei höheren Ionenstärken (NaCl) und höheren Temperaturen.
- AP4: Redox-Untersuchungen: Redoxverhalten von Neptunium und Plutonium in NaCl-Lösungen
- AP5: Stabilität von Huminstoffkolloiden bei hohen Ionenstärken.
- AP6: Löslichkeitsuntersuchungen: Einfluss von Borat auf An(III)/Ln(III)-Löslichkeiten.
- AP7: Themen, die für das Projekt „THEREDA“ Datenlücken schließen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Adsorption von Am(III) an Magnetit und Maghemit:

Die Eisenoxide Magnetit und Maghemit (oxidiertes Magnetit) wurden synthetisch hergestellt und charakterisiert. Die Sorption von Americium wurde an Magnetit und Maghemit mit gleichen Konzentrationen ($m/V = 2,5 \text{ g/L}$; $[Am]_{\text{tot}} = 20 \text{ } \mu\text{mol/L}$) und bei pH-Bedingungen (9,5 – 10,0) in 0.1 M NaCl untersucht. Vorläufige Ergebnisse zeigen eine sehr starke Americium-Sorption an beiden Phasen. Die sorbierte Americium-Spezies wurde mittels XAFS untersucht. In keiner Probe konnte eine Am-Am-Wechselwirkung nachgewiesen werden. Dies deutet darauf hin, dass keine Oberflächenfällung und keine Polymerbildung stattfinden. Allerdings sind bei einer ersten Auswertung kleine Unterschiede in der Struktur des Oberflächenkomplexes zu beobachten, die durch eine sorgfältige Datenauswertung geklärt werden müssen.

U(VI)-Sorption an Illite du Puy unter salinen Bedingungen:

Um die Untersuchungen bezüglich der Actiniden-Sorption An(III-V) an Illit abzurunden, wurden in der vorliegenden Arbeit die U(VI)-Sorption an Illit unter salinen Bedingungen und Ausschluss von CO_2 untersucht. Es wurden Batch-Experimente in NaCl, CaCl_2 und MgCl_2 -Lösung mit verschiedenen Ionenstärken (bis $[\text{NaCl}] = 4,37 \text{ mol/kg}$ und $[\text{M(II)Cl}_2] = 2,11 \text{ mol/kg}$) durchgeführt (Konstante Metallionenkonzentration: $[\text{U}]_{\text{total}} \sim 1^{-10} \times 10^{-7} \text{ mol/kg}$; konstantes S/L-Verhältnis = 2 g/L; pH-Bereich = 3 bis 12). Die Sorption erreicht 99,5 % zwischen $\text{pH}_m = 6.5 - 11$. Bei höheren pH-Werten nimmt die Sorption infolge der Bildung von negativen Hydroxidkomplexen ab. Im Gegensatz zu den dreiwertigen Actiniden zeigt die Sorption von U(VI) nur einen sehr kleinen Einfluss mit zunehmender NaCl-Konzentration von 0,1 bis 4,37 mol/kg. Auch die Variation der U(VI)-Konzentration von 0,1 bis 1 $\mu\text{mol/kg}$ zeigt keinen signifikanten Einfluss auf die Sorption. Auch in CaCl_2 und MgCl_2 -Lösungen wird U(VI) nahezu quantitativ (> 99,5 %) sorbiert, wobei sie bei den 1:2-Elektrolyten etwas kleiner ist als bei dem 1:1-Elektrolyt. Wie bei NaCl ist auch in reinen CaCl_2 und MgCl_2 -Lösungen kaum ein Ionenstärkeeffekt zu beobachten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterführung von Np(V)-Diffusionsexperimenten;

Re-Interpretation von Pu- Sorption-Experimenten auf Kaolinit;

Auswertung der Sorptionsexperimente an Illit in Gegenwart von Fulvinsäure.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vasiliev, A.N.; Banik, N.L.; Marsac, R.; Fröhlich, D.R.; Rothe, J.; Kalmikov, S.N.; Marquardt, C.M.: Np(V) complexation with propionate in 0.1 – 4 M NaCl solutions at 20-85 °C. Dalton Trans., in press. DOI: 10.1039/C4DT03688C

Schnurr, A.; Marsac, R.; Kupcik, T.; Rabung, T.; Lützenkirchen, J.; Geckeis, H.: Sorption of Cm(III) and Eu(III) onto clay minerals under saline conditions: Batch adsorption, Laser-fluorescence spectroscopy and modeling. Geochim. Cosmochim. Acta, in press, DOI:10.1016/j.gca.2014.11.011.

Hinz, K., Altmaier, M., Gaona, X., Rabung, Th., Schild, D., Richmann, M., Reed, D., Alekseev, E., Geckeis, H.: Interaction of Nd(III) and Cm(III) with borate in dilute to concentrated alkaline NaCl, MgCl_2 and CaCl_2 solutions: solubility and TRLFS studies, New Journal of Chemistry, in press, DOI:10.1039/C4NJ01203H

Marsac, R., Banik, N.L., Marquardt, C.M., Kratz, J.V.: Stabilization of polynuclear plutonium(IV) species by humic acid, Geochimica et Cosmochimica Acta, 131, 2014, 290–300

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10971
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.388.894,00 EUR	Projektleiter: Dr. Schmeide	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens sind Beiträge für zuverlässige Prognosen zur Ausbreitung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen in Abwesenheit und Gegenwart von Organika. Es sollen neue Erkenntnisse zum Einfluss von Ionenstärke, Salzmedium bzw. Temperatur auf das Komplezierungs-, Redox-, Sorptions- und Diffusionsverhalten der Radionuklide im System Radionuklid/Tonorganika/Tongestein/Aquifer erhalten werden. Diese Arbeiten zielen auf ein besseres Verständnis der ablaufenden Prozesse sowie auf eine Erweiterung der thermodynamischen Datenbasis und sollen zeigen, inwieweit die bisher in Gegenwart von Porenwässern geringerer Ionenstärke erhaltenen Erkenntnisse zum Migrationsverhalten von Radionukliden im natürlichen Tongestein auf potentielle Tonstandorte in Norddeutschland, deren Grund- und Porenwässer höhere Salinitäten aufweisen, übertragbar sind. Die Ergebnisse liefern somit einen Beitrag zur kontinuierlichen Verbesserung der Kenntnisse und des Instrumentariums zur Prognose der langfristigen Entwicklung untertägiger Entsorgungseinrichtungen. Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Förderprojekten der Universitäten Mainz, Dresden, Saarbrücken, München, Heidelberg, Potsdam und des Karlsruher Instituts für Technologie.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Untersuchung der Komplexierung von Np, U und Pu in ausgewählten Oxidationsstufen mit endlagerrelevanten organischen Liganden in salinaren Lösungen
- Untersuchung der Stabilität von Huminstoff-Kolloiden in Abhängigkeit von der Ionenstärke (Na^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+}) und vom pH-Wert
- Radiotracer-Untersuchungen zur Dynamik von Komplexbildungsgleichgewichten mit huminstoffartigen Liganden
- Untersuchung der Np(V)-Sorptions aus salinaren Lösungen variierender Ionenstärke an synthetischen Behälterkorrosionsprodukten bei 25 °C
- Untersuchung der U(VI)-Sorptions aus salinaren Lösungen variierender Ionenstärke an Tonmineralen und natürlichem Tongestein (Opalinuston). Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika
- Untersuchung der U(VI)-Diffusion im Opalinuston bei erhöhter Ionenstärke bei 25 °C
- Ortsauflösende Untersuchung von Diffusionsprozessen in Tonen mittels Positronen-Emissions-Tomographie (PET)
- Untersuchung des Transports im gestörten Barrierengestein und der Auflockerungszone
- Untersuchung der Wechselwirkung von Actiniden/Lanthaniden mit Ton-Bakterien

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Für das System U(VI)/Montmorillonit/NaCl wurde die Oberflächenkomplexierung bei hohen Ionenstärken (1-3 mol/kg) für CO₂-Ab- und Anwesenheit mit 2SPNE SC/CE-Modell erfolgreich modelliert. Spektroskopischer Nachweis der Uranylkomplexe erfolgte mittels TRLFS und ATR FT-IR. U(VI)-Sorptionisotherme an Montmorillonit in gemischtem Elektrolyten (2.52 mol/kg NaCl, 0.12 mol/kg CaCl₂, 0.048 mol/kg MgCl₂) bei pH 6 und 60 °C aufgenommen: $n_F = 1.85 \pm 0.10$; $\log k_F = 10.6 \pm 0.8$ (zum Vergleich bei 23 °C: $n_F = 0.752 \pm 0.010$; $\log k_F = 2.27 \pm 0.08$).
- Untersuchung der Wechselwirkung des Salz-Referenzstamms *Halobacterium noricense* mit 30 µM Eu(III) in Batch-Experimenten (0-72 h; pH 3.6, 4.5, 5.5, 6.5; 3 M NaCl) in Kombination mit Speziationmessungen mittels TRLFS sowie mit 100 µM U(VI) in Batch-Experimenten (pH 6; 3 M NaCl). Die an den Zellen von *Halobacterium noricense* nach 48 h gebundene Menge Eu(III) (ca. 65 %, unabhängig vom pH-Wert) war im Vergleich zu U(VI) deutlich geringer: Maximale U(VI)-Sorption nach 48 h mit ca. 90 %. Es wurde festgestellt, dass sich mit zunehmender Inkubationszeit Zellagglomerate bildeten.
- Die Gleichgewichts-Dynamik der Metall-Huminstoff-Komplexbildung wurde mittels Isotopenaustausch (¹⁵⁹Tb/¹⁶⁰Tb) in kinetischen Langzeitstudien (abhängig von beiden Kontaktzeiten) für zwei Huminstoffe untersucht. Der Austausch erfolgt an den (maßgeblichen) stärksten Bindungsplätzen sehr langsam und wird durch zeitabhängige Stabilisierungsprozesse zusätzlich beeinträchtigt, so dass in Transportmodellierungen von Gleichgewichts-Einstellzeiten von über einem Jahr auszugehen ist.
- Zur Wechselwirkung von Elektrolytbestandteilen mit Fulvinsäure wurden Radiotracer-Untersuchungen mittels Ultrafiltration durchgeführt.
- Der Ionenstärkebereich der spektroskop. Unters. der U(VI)-Propionat-Komplexierung mittels UV/Vis und TRLFS wurde auf 0,75 bis 4 mol/kg NaClO₄ erweitert. Die abschließende Auswertung erfolgt aktuell mittels Parallel Factor Analysis (PARAFAC) und Anstiegsanalyse.
- Die Korrektur der Positronen-Emissions-Tomographie (PET)-Messungen an OPA-Proben wurde weiter verbessert. Die Ergebnisse sind nun konsistent mit anisotropen FEM-Modellsimulationen anhand von Literaturdaten. Darüber hinaus werden Einflüsse von Heterogenitäten auf den Prozessverlauf erkennbar.

4. Geplante Weiterarbeiten

- U(VI)-Diffusion in kompaktiertem Montmorillonit in 3 mol/kg NaCl und gemischtem Elektrolyten gleicher Ionenstärke unter Ausschluss von CO₂.
- Weitere TRLFS-Untersuchungen zur Wechselwirkung von Eu(III) und Cm(III) mit *Halobacterium noricense*. Charakterisierung der gebildeten Komplexe (Biomasse, Überstand).
- Wechselwirkungs-Studien an binären und ternären Systemen aus [¹⁵²Eu]Eu(III), Opalinuston und Fulvinsäure bei pH 7,5 in Abhängigkeit von der Elektrolytkonzentration (NaCl, MgCl₂, CaCl₂ bis 4 mol/L). Lumineszenzspektroskopische Untersuchungen zur Charakterisierung von Oberflächenkomplexen im System Eu(III)/Opalinuston/Fulvinsäure sowie zur Aufklärung von Stabilisierungsprozessen im System Eu(III)/Huminsäure.
- Weiterführende PET-Diffusionsuntersuchungen mit [²²Na]Na⁺ an ausgewählten Proben mit verbesserter Versuchsanordnung und Auswertung. Quantifizierung von Heterogenitätseinflüssen auf den Diffusionsprozess.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Moll, H., Lütke, L., Bachvarova, V., Cherkouk, A., Selenska-Pobell, S., Bernhard, G.: Interactions of the Mont Terri Opalinus Clay isolate Sporomusa sp. MT-2.99 with curium(III) and europium(III). *Geomicrobiol. J.* 31, 682-696 (2014).

Schmeide, K., Gürtler, S., Müller, K., Steudtner, R., Joseph, C., Bok, F., Brendler, V.: Interaction of U(VI) with Äspö diorite: A batch and in situ ATR FT-IR sorption study. *Appl. Geochem.* 49, 116-125 (2014).

Zuwendungsempfänger: Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 10981
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 613.600,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Reich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Wechselwirkung von Np und Pu mit natürlichem Tongestein wird bei höheren Salinitäten als Funktion des pH-Wertes in An- und Abwesenheit von gelöstem Fe(II) untersucht. Für die Sorption von Np(V) an Montmorillonit werden Sorptionsisothermen bei hohen Ionenstärken gemessen und mit Berechnungen verglichen, die auf einem für niedrige Ionenstärken entwickelten Sorptionsmodell beruhen. Der Einfluss der Temperatur auf die Sorption und Diffusion bei hohen Salinitäten wird schwerpunktmäßig für das System Np-Ton untersucht. Darüber hinaus werden das Sorptionsverhalten und die Speziation von Tc in Tongestein studiert. Die Speziation von Np, Pu und Tc erfolgt mittels XPS, EXAFS/XANES in festen Proben und mit der CE-ICP-MS bzw. CE-RIMS in Lösungen. Diese Untersuchungen sollen die thermodynamische Datenbasis zum Verhalten von Np, Pu und Tc in einem Tongestein bei höherer Salinität erweitern und damit wichtige Informationen für die Modellierung des Langzeitverhaltens dieser Radioelemente in einem möglichen Endlager mit Ton als Wirtsgestein liefern. Im Rahmen des Verbundprojekts wird schwerpunktmäßig mit dem Institut für Ressourcenökologie des Helmholtz-Zentrums Dresden-Rossendorf, dem Institut für Nukleare Entsorgung des Karlsruher Instituts für Technologie, der Universität des Saarlandes und der TU München zusammengearbeitet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Batchexperimente zur Sorption von Np an Montmorillonit und von Np und Pu an natürlichem Tongestein bei höheren Salinitäten in Abhängigkeit des pH-Wertes
- Untersuchung des Einflusses von gelöstem Fe(II) auf das geochemische Verhalten von Np und Pu in natürlichem Tongestein
- Speziation von Np und Pu bei der Wechselwirkung mit natürlichem Tongestein unter hohen Salinitäten
- Diffusionsexperimente mit Np in natürlichem Tongestein bei höheren Salinitäten und Temperaturen von 25 und 60 °C
- Sorption und Speziation von Tc bei der Wechselwirkung mit natürlichem Tongestein.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Einfluss von Erdalkalitionen auf die Sorption von 8×10^{-6} M Np(V) an Opalinuston (OPA) wurde in dem pH-Bereich von 3,5 bis 8,5 in 0,03 M und 1 M MgCl₂-Lösungen an Luft und unter Argonatmosphäre untersucht. Dabei konnte bei $\text{pH} \geq 7$ eine deutliche Abnahme der Np-Sorption mit zunehmender MgCl₂-Konzentration festgestellt werden. So ist bei pH 8,5 in 0,03 M MgCl₂

der K_d -Wert für Np(V) gleich 170 ± 13 L/kg, während in 1 M $MgCl_2$ der K_d -Wert 45 ± 6 L/kg beträgt. In analogen Batchexperimenten in 0,1 und 1 M NaCl-Lösungen war die Sorption von Np(V) an OPA bei pH 7,6 unabhängig von der Konzentration der Na^+ -Ionen und höher als bei den Versuchen in den $MgCl_2$ -Lösungen.

Die pH-Abhängigkeit der Sorption von 2×10^{-7} M Pu(III) und 4×10^{-7} M Am(III) an OPA wurde in 0,1 M $CaCl_2$ -Lösung untersucht. Beide Radioelemente zeigten einen nahezu identischen Sorptionsverlauf mit einer pH-Kante (50 % Sorption) bei pH 5,5 und vollständiger Sorption ab pH 6,5. Auf Grund der gemessenen E_h -pH-Werte muss davon ausgegangen werden, dass ab pH 5 das Pu(III) zu Pu(IV) oxidiert wurde. Durch die Speziation des nach der Sorption in Lösung verbliebenen Pu mit Hilfe der CE-ICP-MS konnte diese Vermutung bestätigt werden, d. h. bei pH 4 wurde Pu(IV) als dominierende Spezies bestimmt, während bei pH 2 nur Pu(III) nachgewiesen wurde. Im Vergleich zum NaCl-Medium liegt die pH-Kante der Sorption von Pu(III) in 0,1 M $CaCl_2$ ca. eine pH-Einheit höher als in 0,1 M NaCl.

Weiterhin wurde der Salinität der $CaCl_2$ -Lösung ($c = 0,01, 0,1, 1$ und 2 M) auf die Sorption von Am(III) an OPA bei pH 5,5 in Batchversuchen studiert. Dabei wurde eine kontinuierliche Abnahme der Sorption von Am(III) von 80 % auf < 10 % mit zunehmender Salinität beobachtet. Dies stimmt mit der Erwartung überein, dass bei pH 5,5 die Sorption der Metallkationen an Tonmineralien wie Montmorillonit durch Kationenaustausch dominiert ist.

Für die Untersuchung der Diffusion von Tc(VII) in OPA mit OPA-Porenwasser (pH 7,6) als mobile Phase wurden mehrere Diffusionszellen mit senkrechter und paralleler Schichtung des Tons relativ zur Diffusionsrichtung bei Raumtemperatur und 60 °C gestartet. Zunächst wurden die Zellen durch Diffusionsexperimente mit HTO charakterisiert. Die erhaltenen Porositäten betragen $0,22 \pm 0,02$. Die gemessenen Diffusionskoeffizienten für HTO zeigen die aus anderen Versuchen bekannte Zunahme von D_e mit der Temperatur ($D_e(25$ °C) = $2,9 \pm 0,2 \times 10^{-11}$ m²/s, $D_e(60$ °C) = $10,0 \pm 0,5 \times 10^{-11}$ m²/s). Damit können diese Zellen für die geplanten Diffusionsexperimente mit Tc(VII) eingesetzt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- μ -XRF- und μ -XANES-Messungen an der Swiss Light Source zur Diffusion von Np in OPA.
- Batchexperimente zum Einfluss der Ionenstärke von $MgCl_2$ auf die Sorption von Pu(III) an OPA.
- Untersuchungen zur Reversibilität der Sorption von Pu und Np an OPA mittels CE-ICP-MS.
- Abschluss der Experimente zur Diffusion von Tc(VII) in OPA bei 60 °C an Luft und Vergleich mit Experimenten bei Raumtemperatur.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Ch. Fuhr: *Sorption von Np(V) an Montmorillonit*, 2014 (Bachelorarbeit).

N. Böhmer: *Sorption von Np(V) an Opalinuston in $MgCl_2$ -Lösungen*, 2014 (Bachelorarbeit).

T. Reich, S. Amayri, J. Drebert, D.R. Fröhlich, D. Grolimund, U. Kaplan, J. Börner: *Speciation of neptunium after diffusion in Opalinus Clay*, Poster auf dem DAEF 2014 Symposium "Key topics on deep geological disposal", 25.-26.09.2014, Köln.

Zuwendungsempfänger: Universität des Saarlandes, Campus der Universität des Saarlandes, 66123 Saarbrücken		Förderkennzeichen: 02 E 10991
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 715.882,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kickelbick	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Forschungsvorhabens ist die Untersuchung des geochemischen Verhaltens (Sorption bzw. Desorption, Migration sowie Komplexierung bzw. Kolloidbildung) von Uran (U(VI)) und Lanthaniden (Eu(III), Gd(III)) als deren Stellvertreter für dreiwertige Actiniden, vor allem unter dem Einfluss von Grundwasserbedingungen mit höheren Salinitäten (Na, Ca und Mg bis 5 mol/L) im natürlichen Tongestein. Hierbei wird auch der Einfluss von unterschiedlichen Komplexliganden auf die Sorption bzw. Desorption von U(VI) und Lanthaniden berücksichtigt. Zusätzlich wird ein Teil dieser Untersuchungen bei höheren Temperaturen und höheren Ionenstärken durchgeführt, um die noch vorhandenen Datenlücken zu verringern. Ein zweiter Projektschwerpunkt beschäftigt sich mit dem Komplexierungsverhalten von Uran und Lanthaniden (Eu, Gd) mit organischen und anorganischen Komplexliganden (Tonorganik unterschiedlicher Herkunft, Borat) in salinaren Systemen. Durch Anwendung neuer (NMR, Dialyse) bzw. Anpassung vorhandener Verfahren zur Metall-Speziation (Ultrafiltration, CE- bzw. LC-ICP-MS) an salinare Systeme sollen insbesondere Komplexbildungskonstanten bei höherer Ionenstärke bestimmt werden. Die im Vorgänger-Projekt entwickelten LC-Miniatur-Säulenversuche werden eingesetzt, um den Einfluss der Temperatur sowie anderer relevanter geochemischer Parameter auf die Mobilität der Metalle im kompakten Tongestein zu untersuchen.

Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit dem Karlsruher Institut für Technologie, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf und den Universitäten Dresden, Heidelberg, Mainz, München und Potsdam.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Bestimmung der Einflüsse geochemischer Parameter auf die Sorption von Eu(III), Gd(III) und U(VI) in Opalinuston (OPA) mit Hilfe von Batch-Versuchen (binäres System)
- AP2: Bestimmung der Einflüsse geochemischer Parameter auf die Desorption von Lanthanoiden und Radionukliden (Eu, Gd und U) in natürlichen Tonformationen mit Hilfe von Batch-Versuchen
- AP3: Bestimmung der Einflüsse von Tonorganik und anorganischer Komplexliganden auf die Sorption von Eu, Gd und U an Tongestein bei Grundwasserbedingungen mit hohen Salinitäten (NaCl)
- AP4: Untersuchungen zum Komplexierungsverhalten von Eu, Gd und U mit organischen und anorganischen Komplexliganden im Übergang von wässrigen Lösungen auf salinare Systeme durch geeignete Speziation-Methoden; Anpassung der vorhandenen Tools zur Metall-Speziation in salinaren Systemen
- AP5: Einfluss von unterschiedlicher Salinität sowie anorganischer Komplexliganden auf die Speziation der untersuchten Metalle mit Fulvin- bzw. Huminsäure mit Hilfe der entwickelten Nachweis- und Speziations-Methoden und Vergleich mit der Speziation von Modellorganika
- AP6: Einfluss zweiwertiger Ionen (Ca bzw. Mg) auf das Sorptionsverhalten von Eu und U(VI) an Opalinuston in Gegenwart/Abwesenheit organischer Komplexliganden (z. B. Elliot Soil-HA; Aldrich-HA; Suwannee River-NOM, HA aus den Gorleben Bohrlöchern 570 und 850)
- AP7: Untersuchung des Einflusses der Salinität höherwertiger Ionen (Ca bzw. Mg) und des pH-Wertes auf das Komplexierungsverhalten von Eu und U(VI) mit natürlichen organischen Komplexliganden unterschiedlicher Bindungsstärke (siehe AP6)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden Sorptionsisothermen von Europium für Opalinuston (OPA) bei verschiedenen Ionenstärken (0,01 bis 5,0 mol/L) und pH-Werten (pH 5 und 7) aufgenommen. Neben dem Einfluss unterschiedlicher Konzentrationen (0,5 bis 50 mmol/L) an zweiwertigen Konkurrenzkatonen (Ca) wurde auch der Einfluss verschiedener Huminsäuren (Elliot Soil-HA; Aldrich-HA; Gorleben-HA) untersucht. Die Untersuchungen im ternären System (Me-OPA-HA) haben gezeigt, dass die Huminsäure die Sorption bei beiden untersuchten pH-Werten erhöht. Dabei ist der Einfluss der Elliot Soil-HA (EHA) am höchsten und der Gorleben Huminsäure (GoHy) am niedrigsten. Die $\log K_d$ -Werte nehmen in Gegenwart der EHA um etwa eine log-Einheit zu, wobei der Effekt bei pH 5 und niedriger Ionenstärke (0,01 M) am höchsten ist und mit steigender Ionenstärke abnimmt. Die Gegenwart von höheren Konzentrationen an NaCl verringert den Effekt der Huminsäure sichtbar.

Die Untersuchungen mit steigender Konkurrenzkatonen-Konzentration (Anwesenheit von 0,5 bis 50 mM Ca) wurden bisher nur bei niedriger Ionenstärke (0,01 M) und im binären System durchgeführt. Sie belegten einen negativen Einfluss der Ca-Konzentration auf die Sorption von Eu an OPA. Bei pH 5 konnte wie erwartet eine starke Konkurrenz zwischen Ca und Eu beobachtet werden. Die Sorption des Europiums am OPA nimmt mit erhöhter Ca-Konzentration ab. Bei pH 7 bleibt die Europium-Sorption annähernd von der Ca-Konzentration unberührt.

Die Untersuchungen zur Komplexierung von Europium/Uran mit verschiedenen natürlichen organischen Verbindungen bei hoher Ionenstärke wurden mittels Dialyse und Ultrafiltration durchgeführt.

Bei den Experimenten zur Bestimmung der Komplexbildungskonstanten mittels Membrandialyse (Float-A-Lyzer[®] G2 von Spectra/Por[®], Größenausschluss bzw. MWCO: 100 bis 5000 Da) konnten schon in Vorversuchen nur mit reinen Metalllösungen keine reproduzierbaren Ergebnisse ermittelt werden. Somit wurde auf die weitere Fortführung der Dialyse-Experimente verzichtet.

Für die Ultrafiltrations-Versuche wurden verschiedene Systeme getestet (Amicon[®] Ultra von Merck Millipore, MicrosepTM Advance 3K Omega von Pall Life Science und Vivaspin 2 von Sartorius). Aufgrund der Ergebnisse aus den Vorversuchen wurden für weitere Untersuchungen zur Bestimmung der Komplexbildungskonstanten die Amicon[®] Ultra 4 mL Filter (MWCO: 3 kDa) verwendet.

Als Organika wurden Elliot Soil-HA, Aldrich-HA, Gorleben-HA und Suwannee River-NOM verwendet. Die Ergebnisse stimmen sehr gut mit den Sorptionsuntersuchungen im ternären System überein, da die Komplexstabilität in 0,1 mol/l NaCl ebenfalls von EHA ($\log\beta_{Eu} = 6,8$; $\log\beta_U = 6,1$) über AHA ($\log\beta_{Eu} = 6,4$; $\log\beta_U = 6,0$) und GoHy ($\log\beta_{Eu} = 6,0$; $\log\beta_U = 5,9$) zu SNOM ($\log\beta_{Eu} = 4,5$; $\log\beta_U = 4,7$) abnimmt. Zudem konnte ebenfalls der Einfluss erhöhter Ionenstärke und erhöhter Konkurrenzkatonen-Konzentrationen (Ca) auf die Komplexstabilität untersucht werden. Dabei wurde beobachtet, dass die Komplexstabilität von HA mit Europium in Gegenwart erhöhter Ionenstärke und Konkurrenzkatonen abnimmt. Mit Uran konnte aber ein gegenläufiger Effekt beobachtet werden, was vermutlich auf die unterschiedliche Art der Komplexierung von Uran und Europium zurück zu führen ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Während des Aufstockungszeitraums wird weiterhin der Einfluss erhöhter Konzentration an Ca (als zweiwertiges Konkurrenzion zu Eu und U) auf die Sorption von Europium an Opalinuston bei höheren Ionenstärken untersucht. Diese Untersuchungen sollen im binären (Me-OPA) sowie im ternären System (Me-OPA-HA) mit den verschiedenen Huminsäuren (Elliot Soil HA, Aldrich HA, Gorleben HA und Suwannee River NOM) durchgeführt werden. Auch der Einfluss unterschiedlicher HA auf die Europium Sorption soll noch weiter untersucht werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Hahn Ramona (2014): Untersuchungen zur Metallkomplexierung von Europium und Uran mit organischen Komplexliganden mittels Dialyse und Ultrafiltration. Masterarbeit, Universität des Saarlandes.

Wiehn Tobias (2014): Untersuchungen zum Sorptionsverhalten von Huminsäure, Europium und Uran an Opalinuston. Bachelorarbeit, Universität des Saarlandes.

Hein, C., Sander, J.M., Kautenburger, R. (2014): Speciation via Hyphenation - Metal Speciation in Geological and Environmental Samples by CE-ICP-MS. Journal of Analytical & Bioanalytical Techniques 5, 225.

Kautenburger, R. (2014): Hochradioaktive Abfälle – Analytische Tools zur Suche nach einem geeigneten Endlager, GIT Labor-Fachzeitschrift 58(9), 38-41.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München	Förderkennzeichen: 02 E 11001
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 716.518,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krüger

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

- Quantenmechanische Modellierung der Sorption von Actinidenspezies an Tonmineraloberflächen.
- Quantenmechanische Modellierung der Komplexierung von Actiniden mit Tonorganika und in salinaren Lösungen

Bezug zu anderen Vorhaben:

Teilprojekt im Verbund „Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen“.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete:

AP1: Adsorption von Actiniden an Tonmineralien

AP2: Komplexierung von Actiniden in Lösung.

Arbeitspaket 1 (AP) umfasst quantenmechanische Berechnungen periodischer Modelle von Tonmineralien sowie die Untersuchungen der Adsorption von Actinidenspezies auf Tonmineraloberflächen. In AP2 werden computerchemische Untersuchungen zu Komplexen von Actiniden in wässriger Lösung durchgeführt. Schwerpunkte sind die Modellierung der Komplexierung durch Tonorganika sowie insbesondere organische Americiumkomplexe.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1: Adsorption von Np(V); AP1.2: Eisensubstituierte Tonminerale; AP2.1 Komplexe einfacher Carboxylate; AP2.3 Boratesterkomplexe.

Die Untersuchung der Adsorption von Actinoiden auf Kantenflächen von schichtgeladenen Tonmineralen wurde für U(VI) fortgeführt und auf Np(V) ausgedehnt (AP1.1). Hierbei wird die kürzlich in diesem Projekt entwickelte dynamische Methode des simulierten Tempens angewandt, um die Solvatschicht der Oberfläche zu äquilibrieren und damit zuverlässige Komplexbildungsenergien zu erhalten. Bisherige Rechnungen zu U(VI) auf (110)-Kantenflächen von Smektitmodellen wurden um Modellierungen auf (010)-Kantenflächen er-

gänzt. Während Bildungsenergien für die (110)-Oberfläche wie erwartet den effektiven Sauerstoffladungen der Adsorptionsplätze folgen, wurden auf der (010)-Oberfläche Ausnahmen gefunden, die weiter untersucht werden müssen. Die Adsorption von Np(V), die bisher noch nicht rechnerisch untersucht wurde, wurde für (110)-Kantenflächen von Montmorillonit modelliert. Neben bidentat gebundenem vier- und fünffach koordinierten NpO_2^+ werden hier aufgrund der niedrigen Ladung von Np(V) auch monodentate Spezies betrachtet und mit U(VI) verglichen. Voroptimierungen zeigen für Np(V) im Gegensatz zu U(VI) keine Hydrolyse. Für mono- und bidentat koordiniertes NpO_2^+ werden ähnliche Bildungsenergien berechnet, während für UO_2^{2+} bidentat gebundene Spezies leicht bevorzugt sind. Diese vorläufigen Ergebnisse werden derzeit mittels simulierten Temperns verbessert. Zur Vorbereitung der Untersuchung des Effektes von Eisensubstitutionen auf die Adsorption von U(VI) (AP1.3) wurden eisensubstituierte Smektite optimiert, wobei nur Energieunterschiede von weniger als 10 kJ/mol für verschiedene Positionen der Fe^{3+} -Ionen im Gitter gefunden wurden.

Modellierungen zur Komplexierung von U(VI), Np(V) und Am(III) mit leichten Tonorganika (AP2.1) wurden u. a. durch Rechnungen zu Np(V)-Monoformiat und -acetat sowie zu Am(III)-Diacetat ergänzt. Für 5-fach koordinierte NpO_2^+ -Komplexe ergab sich für Acetat eine klarer bevorzugte bidentate Koordination als für UO_2^{2+} . Formiat, das an UO_2^{2+} bevorzugt monodentat koordiniert, bindet an NpO_2^+ geringfügig stärker bidentat als monodentat, so dass mit beiden Isomeren im Gleichgewicht zu rechnen ist. Der Vergleich von Monoacetat und -formiatkomplexen zeigt eine Tendenz zu stabilerer bidentater Koordination von U(VI) über Am(III) zu Np(V). Am(III)-Diacetatkomplexe mit den Koordinationszahlen 8 und 9 zeigen bidentat gebundene Liganden im stabilsten Isomer, während Rechnungen für U(VI)-Diacetat auf ein Gemisch mono- und bidentater Isomere mit verschiedenen Koordinationszahlen hindeuten. Rechnungen zu Am(III)-Formiat werden zur Unterstützung geplanter Experimente des Projektpartners Uni Heidelberg fortgeführt. Angeregt durch Arbeiten des Projektpartners TU Dresden werden in AP2.3 Am(III)-Boratesterkomplexe untersucht. Ein Vergleich von Lactatoborat und Salicylatoborat sowie ihrer Na-Komplexe mit Monoborat deutet auf ein schwächeres Komplexierungsverhalten der Boratesterliganden. Dies konnte für Am(III)-Lactatoborat bestätigt werden, wobei die Bindungsstärke für 8-fach koordiniertes Am(III) etwa halb so groß wie für Monoborat berechnet wurde. Wie für Monoborat ist der monodentate Am(III)-Lactatoboratkomplex etwas stabiler als der bidentate.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.1: Adsorption von Np(V); AP1.2: Konkurrenzadsorption; AP1.3: Eisensubstituierte Tonminerale;

AP2.1: Einfache Carboxylate; AP2.2: Wechselwirkung mit Tonorganika; AP2.3: Boratkomplexe

5. Berichte, Veröffentlichungen

ATAS Workshop 2014, Helmholtz-Zentrum Dresden Rossendorf, 3.-7. 11. 2014:

Vortrag A. Kremleva, S. Krüger: Computational modeling of actinide adsorption on edge surfaces of 2:1 clay minerals;

Poster S. Krüger: Quantum chemical modeling of actinide borate complexes in aqueous solution

Zuwendungsempfänger: Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 11011
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 444.232,00 EUR	Projektleiter: apl. Prof. Dr. Kumke	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist die weiterführende Charakterisierung der Wechselwirkungen von Lanthanoid-Ionen (als natürliche Analoge der Actinide) mit endlagerrelevanten Systemkomponenten bei hohen Ionenstärken und erhöhten Temperaturen zur Erweiterung des molekularen Prozessverständnisses im natürlichen Tongestein bzw. in salinaren Systemen. Zur Erreichung dieses Ziels werden verschiedene laserbasierte Methoden – zeitaufgelöste und stationäre Lumineszenzspektroskopie sowie Transientenabsorptionsspektroskopie – eingesetzt, die mit weiterführenden Methoden wie der konfokalen Raman-Mikroskopie als bildgebendem Verfahren ergänzt werden.

Das geförderte Projekt 02 E 11011 ist ein Teilvorhaben des Verbundprojektes „Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen“, das gemeinsam mit den Universitäten Dresden, Heidelberg, Mainz, München, Saarbrücken sowie des Karlsruher Institutes für Technologie (KIT) und dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) durchgeführt wird. Eine thematische Verknüpfung besteht vor allem zu den Projektpartnern an der TU Dresden, der TU München und der Universität Heidelberg sowie dem HZDR und dem Institut für Nukleare Entsorgung (KIT).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Speziationsuntersuchungen unter besonderer Berücksichtigung von Ion-Ion-Wechselwirkungen bei hohen Ionenstärken
- AP2: Photophysik von Eu(III)-Komplexen mit Modellliganden bei hohen Ionenstärken bzw. erhöhten Temperaturen
- AP3: Komplexierung von Eu(III) durch Polymere und natürliche organische Liganden bei hohen Ionenstärken unter Berücksichtigung der Kationen- bzw. Anioneneigenschaften
- AP4: Photophysik von Eu(III)-Komplexe mit Tonmineralphasen in An- und Abwesenheit von Modellliganden bei hohen Ionenstärken bzw. erhöhten Temperaturen

Aufstockungsphase:

- AP A1: Lumineszenzuntersuchungen an Ln(III)-Komplexen mit Modellliganden bei hohen Ionenstärken bzw. erhöhten Temperaturen
- AP A2: Lumineszenzuntersuchungen von Ln(III) in Gegenwart von Modellpolymeren bzw. natürlichen organischen Liganden (Huminstoffen) bei hohen Temperaturen (auch unter Berücksichtigung der Ionenstärke) und auf Mineraloberflächen
- AP A3: Kombination von zeitaufgelöster Lumineszenzspektroskopie mit TIRF-Mikroskopie zur Untersuchung von Diffusionsprozessen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im AP A1 wurden als Modellliganden aus den Gruppen A bis C Salicylsäure, Phthalsäure und Anthranilsäure verwendet. Zu entsprechenden Lösungen diese Säuren wurden Samarium(III), Dysprosium(III) und Terbium(III) gegeben, wobei überwiegend 1:1-Komplexe vorlagen. Alle Mischungen wurden zusätzlich bei verschiedenen Konzentrationen an Hintergrundelektrolyt (0 mol.L^{-1} , 0.1 mol.L^{-1} , 1.0 mol.L^{-1} und 4.0 mol.L^{-1} mit Natriumchlorid) hergestellt. Von diesen Lösungen wurden bei verschiedenen Temperaturen ($5 \text{ }^\circ\text{C}$ bis $80 \text{ }^\circ\text{C}$ in ca. 10 K Schritten) zeitaufgelöste Lumineszenzspektren aufgenommen.

Die verwendeten Lanthanoidionen unterscheiden sich in der Zahl der f-Elektronen und folglich auch in ihren spektroskopischen Eigenschaften. Somit sind in den verschiedenen Lanthanoid-Modellligand-Komplexen unterschiedliche elektronische Wechselwirkungen möglich. Das eröffnet einen Weg, die Photophysik von Lanthanoid-Ligand-Komplexen noch besser zu verstehen. Aus der Temperaturabhängigkeit der aus den zeitaufgelösten Lumineszenzspektren erhaltenen Abklingzeiten können die Aktivierungsenergien für verschiedene Deaktivierungsprozesse der Lanthanoid-Lumineszenz bestimmt werden. So zeigte sich für die Löschung über OH-Schwingungen (z. B. aus koordiniertem Wasser) eine sehr kleine Aktivierungsenergie. Die Löschung über den Liganden dagegen zeigt eine größere Temperaturabhängigkeit und damit eine größere Aktivierungsenergie. Diese Untersuchungen wurden sowohl mit direkter (über das Lanthanoidion) als auch mit indirekter Anregung (über den Liganden) durchgeführt.

Die Messungen der Lumineszenzquantenausbeuten bei Raumtemperatur und 80 K wurde für verschiedene Vertreter aus den Ligandgruppen A bis C durchgeführt. Die Löschung der Lanthanoidlumineszenz durch den Liganden ist in Europium(III)-Komplexen stärker als für Terbium(III)-Komplexe. Die beobachtete Energietransfereffizienz bei sensibilisierter Anregung vom Liganden auf das Lanthanoidion ist für Terbium(III)-Komplexen höher.

Die Arbeiten im Arbeitspaket AP A3 wurden aufgenommen. Messungen gemeinsam mit dem KIT-INE am TIRF-Mikroskop haben gezeigt, dass die Integration weiterer Komponenten an ein Mikroskopsystem die Aussagekraft orts aufgelöster Messungen an Tonproben deutlich erhöhen kann. Daher wird im Augenblick ein Mikroskopaufbau mit einem Spektrographen, ausgestattet mit einer sehr empfindlichen EMCCD, erweitert. Hierdurch ist dann zusätzlich zur Abklingzeit das Emissionsspektrum der Lanthanoid-Lumineszenz zugänglich.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die zukünftigen Arbeiten werden das Arbeitspaket AP A1 und AP A3 komplettieren. Weiterhin wird das Arbeitspaket AP A2 angegangen.

AP A1: Hier stehen die Messungen zum „Tiefemperaturbereich“ aus. Es werden geeignete Lanthanoidionen-Ligand-Paare ausgewählt, für die zeitaufgelöste Lumineszenzmessungen bei Temperaturen $< 273 \text{ K}$ durchgeführt werden.

Der Brechungsindex hat einen Einfluss auf die quantitative Auswertung von spektroskopischen Messungen. Es werden Temperatur- und Ionenstärkeeffekte auf den Brechungsindex für den interessierenden Bereich recherchiert und gegebenenfalls bestimmt.

AP A2: Hier wird die gesamte Bandbreite der zeitaufgelösten Messungen auf Komplexe zwischen Lanthanoidionen und natürlicher organischer Liganden bzw. Modellpolymere ausgeweitet. Es werden Untersuchungen in Abhängigkeit der Ionenstärke und Temperatur der Ligand-Lanthanoidion-Mischungen durchgeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Katja Burek: Temperatur- und Ionenstärke-Einflüsse auf die Lumineszenz von Lanthanoiden in Komplexen mit niedermolekularen organischen Liganden, Diplomarbeit, Universität Potsdam (2014)

Tobias Garling: Schwingungsspektroskopische Untersuchung der Adsorption aliphatischer Carbonsäuren auf Tonmineralien, Masterarbeit, Universität Potsdam, in Vorbereitung.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11021
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 377.336,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Stumpf	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel der Arbeiten ist die Ableitung thermodynamischer Daten zur Wechselwirkung von Am(III) mit endlagerrelevanten Liganden in (hoch)salinaren Medien. Das Hauptaugenmerk liegt auf Untersuchungen zur Komplexbildung von Am(III) mit Borat und kleinen organischen Liganden, die als Modell für natürliche organische Materie (mobile Tonorganika, Huminstoffe) fungieren.

Die ermittelten thermodynamischen Daten (Komplexbildungskonstanten, Enthalpien und Entropien, Wechselwirkungskoeffizienten) sollen zu einer wirklichkeitsgetreuen Modellierung der Wechselwirkung von Am(III) in realen salinaren Medien beitragen und vorhandene Lücken in den thermodynamischen Datenbasen schließen. Erstmals sollen Am(III)-Boratspezies in Lösung direkt spektroskopisch und thermodynamisch charakterisiert werden.

Das Forschungsvorhaben erfolgt in enger Kooperation mit den Verbundprojekten der Universitäten Mainz, Saarbrücken, München, Potsdam und Heidelberg sowie dem Institut für Ressourcenökologie vom Helmholtzzentrum Dresden-Rossendorf und dem Institut für Nukleare Entsorgung vom Karlsruhe Institut für Technologie.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Einsatz der Mikrotitrationskalorimetrie (ITC):

Direkte Bestimmung der thermodynamischen Daten (Enthalpie, Entropie) zur Wechselwirkung von Eu(III)/Am(III) mit Borat und organischen Modellliganden mittels Mikro-Titrationskalorimetrie in Abhängigkeit verschiedener Untersuchungsparameter (pH, I, T und Medium)

AP1: Untersuchung im System Am(III)-Borat-salinare Lösung

Spektroskopische Charakterisierung von Am(III)-Boratspezies in Lösung u. a. mittels TRLFS, UV-Vis, FT-IR und Ramanspektroskopie sowie Bestimmung der thermodynamischen Daten zur Komplexbildung von Am(III) mit Borat unter Standardbedingungen ($T = 25\text{ °C}$, $I < 0.1\text{ M NaClO}_4$) und in salinaren Medien unter Variation von Ionenstärke (bis 3 M), Salzmedium (NaCl, MgCl₂) und Temperatur (bis 80 °C) bei $\text{pH} > 7$

AP2: Untersuchungen im System Am(III)-NOM-salinare Lösung

Bestimmung der thermodynamischen Daten zur Komplexbildung von Am(III) mit sauerstoffhaltigen Modellliganden (u. a. von Salicyl-, Propion-, Wein-, Pyromellitsäure) unter Variation von pH (2-9), Ionenstärke (bis 3 M), Salzmedium (NaCl, MgCl₂) und Temperatur (bis 80 °C).

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

- Mittels ^{11}B -NMR-Spektroskopie wurde die Bildung von Polyboraten für weitere verschiedenen konzentrierte Elektrolytmedien (KCl , CaCl_2 , MgCl_2 , jeweils $I = 0.1$ m und 3 m) untersucht. Analog zu dem NaClO_4 - und dem NaCl -Medium wurde keine signifikante Abhängigkeit der Polyborat-Bildung in den verschiedenen konzentrierten Salzmedien beobachtet.
- Untersuchungen der Eu(III) -Polyborat Komplexierung in Abhängigkeit der Ionenstärke (Medium: NaCl , bis $I = 3$ m) mittels TRLFS zeigen, dass mit steigender Ionenstärke eine Abnahme der Komplexierung zu beobachten ist. Mittels SIT (specific ion interaction theory) wurden folgende Werte abgeleitet: $\log \beta_{11}^0 = 3.20$ und $\Delta\varepsilon = -0.12$ kg/mol (für Gleichung: $\text{Eu}^{3+} + \text{B}^- \rightarrow \text{EuB}^{2+}$, B = Polyborat).
- Es wurden erste Untersuchungen der Am(III) -Polyborat Komplexierung bei $I = 0.1$ m (NaCl) mittels UV/Vis-Spektroskopie (mit 1 m Kapillarzelle) durchgeführt. Es wurde eine vorläufige Komplexbildungskonstante von $\log \beta_{11} = 2.5$ (für Gleichung: $\text{Am}^{3+} + \text{B}^- \rightarrow \text{AmB}^{2+}$, B = Polyborat, für $I = 0.1$ m) bestimmt.
- Mittels ^{11}B -NMR wurde die Salicylatoborat-Bildung und die Eu(III) -Salicylatoborat Komplexierung in Abhängigkeit der Ionenstärke (NaCl) untersucht. Die Salicylatoborat-Bildung nimmt minimal mit steigender Ionenstärke zu (~ 0.1 lg-Einheiten von $I = 0.1$ m auf $I = 3$ m), die Eu(III) -Salicylatoborat Komplexierung nimmt ab.

AP2:

- Die Lactat-Protonierungsreaktion und die Eu -Lactat-Komplexierung wurden mittels isothermer Titrationskalorimetrie in Abhängigkeit der Ionenstärke ($0.1 - 2$ m NaCl) untersucht. Folgende Werte wurden mittels SIT ermittelt: a) für $\text{Lac}^- + \text{H}^+ \rightleftharpoons \text{LacH}$, $\log \beta_{11}^0 = 3.77 \pm 0.02$ mit $\Delta\varepsilon = -0.17 \pm 0.01$, $\Delta H_{11}^0 = 0.51 \pm 0.02$ kJ·mol $^{-1}$ mit $\Delta\varepsilon_L = (1.24 \pm 0.02) \cdot 10^{-3}$ kg/mol·K (mit $\Delta\varepsilon_L =$ Summe der enthalpischen Wechselwirkungskoeffizienten); b) für $\text{Eu}^{3+} + \text{Lac}^- \rightleftharpoons \text{EuLac}^{2+}$, $\log \beta_{11}^0 = 3.81 \pm 0.09$ mit $\Delta\varepsilon = -0.16 \pm 0.04$, $\Delta H_{11}^0 = 2.43 \pm 0.10$ mit $\Delta\varepsilon_L = (0.92 \pm 0.08) \cdot 10^{-3}$ kg/mol·K.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Erweiterung der Untersuchungen zur An/Ln(III) -(Poly)borat-Komplexierung in Abhängigkeit der Ionenstärke auf weitere Elektrolyte (NaClO_4 , KCl , CaCl_2 , MgCl_2 , bis $I = 3$ m)
- Fortführung der Arbeiten im Am(III)/Cm(III) -Polyborat Komplexierungssystem
- Ionenstärkeabhängige Untersuchung des Cm -Lactat-System mittels TRLFS
- Erweiterung/Verfeinerung der ITC-Messungen des Nd -Oxalat-Systems durch Bestimmung der Fällungsenthalpie des 2:3 Feststoffes
- Publikation zu den ITC-Messungen des Eu -Lactat-Systems in Zusammenarbeit mit Andrej Skerencak-Frech (Uni Heidelberg)
- Publikation: J. Schott, M. Acker et al.: "Interaction of Eu(III) with Organoborates - A further Approach to Understand the Complexation in the An/Ln(III) -Borate System" submitted to Dalton Transactions

5. Berichte, Veröffentlichungen

Franziska Taube: „Untersuchungen zur Komplexierung von Am(III) , Eu(III) und Nd(III) mit Oxalat bei hohen Ionenstärken“, Masterarbeit TU Dresden (02.06.2014)

Thomas Radoske: “ UV/Vis-spektroskopische Untersuchung der Komplexierung von Neodym(III) und Americium(III) in Polyboratlösungen”, Bachelorarbeit TU Dresden (25.09.2014)

Poster: Schott, J., Kretzschmar, J., Acker, M., Tsushima, S., Drobot, B., Eidner, S., Kumke, M. U., Barkleit, A., Brendler, V., Taut, S. Stumpf, T.: Insight into An/Ln(III) -Borate-Organic System- Combination of different Techniques and Theory ist he key. Advanced Techniques in Actinide Spectroscopy (ATAS 2014), 03.-07.11.2014, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Germany

Poster: Barkleit, A., Kretzschmar, J., Tsushima, S., Acker, M.: Europium(III)lactate structure determination using spectroscopic (ATR FT-IR, NMR) and theoretical (DFT) methods. Actinide Spectroscopy (ATAS 2014), 03.-07.11.2014, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Germany

Zuwendungsempfänger: Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg		Förderkennzeichen: 02 E 11031
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 254.826,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Panak	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel dieses Verbundprojektes ist die Aufklärung des geochemischen Verhaltens von Actiniden im natürlichen Tongestein unter dem Einfluss von nieder- und makromolekularer Organik (Huminstoffe, Tonorganika) bei höheren Ionenstärken sowie höheren Temperaturen. Die Arbeiten innerhalb dieses Teilprojektes beschäftigen sich mit dem Komplexierungsverhalten niedermolekularer tonorganischer Substanzen wie Propionat, Laktat etc. sowie makromolekulare Tonorganik und Kerogen mit dreiwertigen Actiniden im Temperaturbereich bis 90 °C. Dadurch sollen wichtige thermodynamische Daten der im geochemischen Milieu im Nah- und Fernbereich eines Endlagers ablaufenden Reaktionen der dreiwertigen Actinidionen erhalten werden. Das Projekt liefert somit einen entscheidenden Beitrag für eine thermodynamisch fundierte Sicherheitsanalyse zur Langzeitsicherheit von nuklearen Endlagern. Des Weiteren werden grundlegende Erkenntnisse bezüglich des Komplexierungsverhaltens der trivalenten Actiniden und Lanthaniden erhalten, die auch in anderen wissenschaftlichen Bereichen von großer Bedeutung sein können.

Die in diesem Berichtszeitraum durchgeführten Arbeiten erfolgten in direkter Kooperation mit dem Karlsruher Institut für Technologie, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, der Universität Mainz, Potsdam, Köln, Universität des Saarlandes sowie der TU München.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Bestimmung der temperaturabhängigen pK_s -Werte der verwendeten Ligandensysteme und pH-Wert-Messungen bei erhöhten Temperaturen
- AP2: Komplexierung von Cm(III) mit niedermolekularen organischen Substanzen bei höheren Ionenstärken sowie höheren Temperaturen
- AP3: Komplexierung von Cm(III) mit Humin-/Fulvinsäuren/Kerogen bei höheren Ionenstärken sowie höheren Temperaturen
- AP4: Strukturelle Untersuchungen von Ln(III)/Am(III)-Komplexen mit (ton)organischen Liganden mittels Hochtemperatur-EXAFS-Spektroskopie

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die laserspektroskopischen Ergebnisse zur Komplexierung von Cm(III) mit Oxalat in Abhängigkeit der Temperatur (20 - 90 °C) und Ionenstärke (1 - 4 M) wurden durch zusätzliche quantenchemische Rechnungen ergänzt. Die Ergebnisse bestätigen, dass in allen nachgewiesenen Cm(III)-Oxalat-Komplexen ($[\text{Cm}(\text{Ox})_n]^{3-2n}$, $n = 1,2,3,4$) die Liganden über ein Sauerstoffatom von jeweils einer Carboxyl-Gruppe unter Bildung eines fünfgliedrigen Chelatringes („side-on“-Koordination) an das Cm(III)-Ion binden. Eine „end-on“-Koordinaton konnte in allen Fällen ausgeschlossen werden. Des Weiteren wurden die Bindungslängen und -winkel der gebildeten Komplexe berechnet, was einen wesentlichen Beitrag zum Verständnis der Unterschiede in den thermodynamischen Funktionen der Bildung der unterschiedlichen Komplexe liefert.

Die Komplexierung von Cm(III) mit Acetat in verdünnten und konzentrierten CaCl_2 -Lösungen und $T = 20 - 90$ °C wurde auf höhere pH-Werte ausgeweitet. Es wurden Untersuchungen im pH-Bereich bis ~ 6 durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen, dass unter den experimentellen Bedingungen lediglich die bereits bekannten Cm(III)-Acetat-Spezies auftreten ($[\text{Cm}(\text{Ac})_n]^{3-n}$, $n = 1,2,3$). Eventuelle ternäre Spezies mit Ca^{2+} oder OH-Liganden wurden nicht beobachtet. Die bei höheren pH-Werten ermittelten $\log K_n^0(T)$ -Werte sind ebenfalls in guter Übereinstimmung mit denen der bisherigen Arbeiten. Somit ist das aufgestellte chemische Modell auch auf höhere, endlagerrelevante pH-Bereiche anwendbar.

Nach Abschluss der Arbeiten zur Wechselwirkung mit Acetat wurde die Komplexierung von Am(III) mit Laktat ($[\text{Am}^{3+}] \approx 1$ mM, $[\text{Laktat}] \approx 0.03$ M) als Funktion des pH-Wertes ($\text{pH} = 1-7$) mittels EXAFS-Spektroskopie untersucht. Die Messungen wurden vor kurzem abgeschlossen und die erhaltenen Spektren befinden sich noch in der Auswertung. Erste Ergebnisse zeigen eine zunehmende Ausfällung von Am(III) oberhalb von pH 6, die mit hoher Wahrscheinlichkeit einer Ausfällung von Americiumoxid/-hydroxid als Folge von Hydrolyse zugeschrieben werden. Nach Bestimmung der Strukturdaten werden die EXAFS Daten durch thermodynamische Speziationsrechnungen und Faktorenanalyse (ITFA) komplementiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Laserspektroskopische Untersuchungen der Komplexierung von Cm(III) mit Propionat in konzentrierten NaCl-Lösungen bei erhöhten Temperaturen und erhöhten pH-Werten.
- NMR-Untersuchungen zur Komplexierung von Am(III) mit Laktat als Funktion der Temperatur, des pH-Wertes und der Ionenstärke.
- EXAFS-Untersuchungen zur Komplexierung von Am(III) mit Formiat in Abhängigkeit des pH-Wertes (Kooperation mit TU München).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Fröhlich, D.R., Skerencak-Frech, A., Gast, M., Panak, P.J.: Fulvic acid complexation of Eu(III) and Cm(III) at elevated temperatures studied by time-resolved laser fluorescence spectroscopy, Dalton Trans., 2014, 43, 15593-15601.

Fröhlich, D.R., Skerencak-Frech, A., Bauer, N., Rossberg, A., Panak, P.J.: The pH dependence of Am(III) complexation with acetate: an EXAFS study, J. Synchrotron Radiat., 2015, 22, 99-104.

Skerencak-Frech, A., Maiwald, M., Trumm, M., Fröhlich, D.R., Panak, P.J.: The complexation of Cm(III) with Oxalate in aqueous solution at $T = 20 - 90$ °C: A combined TRLFS and quantum chemical study, Inorg. Chem., 2015, in print.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11041
Vorhabensbezeichnung: Kopplung der Softwarecodes FLAC3D und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Untersuchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten in Tongestein unter Endlagerbedingungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2011 bis 31.03.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 761.314,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen der Suche nach einem geeigneten Wirtsgestein für die Endlagerung radioaktiver Abfälle wird in Deutschland seit nunmehr etwa einem Jahrzehnt die Erforschung von Tongestein verstärkt vorangetrieben. Dabei liegt der Fokus auf der wissenschaftlichen Erfassung der Beziehungen zwischen den dort ablaufenden thermischen, hydraulischen und mechanischen (THM) Prozessen. Aufgrund deren gegenseitiger Beeinflussung muss im Hinblick auf eine das Langzeitverhalten eines Endlagers im Tongestein behandelnde Sicherheitsanalyse das THM-gekoppelte Verhalten des Tongesteins beobachtet und physikalisch modelliert werden.

Die wissenschaftliche Erfassung der THM-Prozesse umfasst neben in situ- und laborativen Analysen auch die Formulierung und rechnerische Implementierung THM-gekoppelter physikalischer Modelle sowie deren Validierung anhand von In-situ-Messdaten. Vor diesem Hintergrund besteht das Hauptziel des Vorhabens darin, die EDV-Programme *FLAC^{3D}* und *TOUGH2* für eine Simulation von THM-gekoppelten Prozessen im Tonsteingebirge unter Endlagereinflüssen zu koppeln. Anhand entsprechender experimenteller Untersuchungen sollen noch fehlende physikalische Grundlagendaten ermittelt werden. Darüber hinaus soll mit Blick auf das zeitabhängige Gesteinsverhalten die in den Vorhaben 3607R02596 (BfS) und 02E10427 (BMW) erarbeitete In-situ-Messdatenbank erweitert und als ein Fallbeispiel (von mehreren) zur Validation des neuen Prognoseinstrumentariums herangezogen werden.

Zusätzlich wird eine umfassende, organisationsübergreifende Validierung von Simulatoren einschließlich des neuen gekoppelten Simulators des Zuwendungsempfängers zur Demonstration ihrer Funktionstüchtigkeit angestrebt, zu dessen Zweck Vorbereitungen zur Gewinnung von Partnerorganisationen sowie zur Erarbeitung von zu vergleichenden Berechnungsmodellen im Rahmen dieses Vorhabens getroffen werden sollen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Datenaufarbeitung zu *FLAC^{3D}* (F) und *TOUGH2* (T),
- AP2: Aufarbeitung laborativer Kenntnisse zu HM-Tongesteinseigenschaften,
- AP3: Int. Literaturrecherche zum THM-Materialverhalten von Tongestein/offene Fragen,
- AP4: Erarbeitung einer F-T-Schnittstelle für Modellgitter und Randbedingungen,
- AP5: Erarbeitung von F-T-Kopplungsroutinen zur Übertragung der H \leftrightarrow M-Einflüsse,
- AP6: Erarbeitung von Referenzbeispielen,
- AP7: Durchführung von ersten Testsimulationen,
- AP8: Identifizierung und Charakterisierung implementierter Stoffmodelle,
- AP9: Organisation des In-situ-Untersuchungsprogramms,
- AP10: Ergänzung des In-situ-Equipments,

- AP11: Abstimmung und Durchführung einer Bohrkernbeschaffungskampagne,
 - AP12: Durchführung der In-situ-Untersuchungen Mont Terri & Tournemire,
 - AP13: Erstellung eines Laborprogramms/Anpassung bestehender laborativer Ausrüstung,
 - AP14: Durchführung eigener laborativer Untersuchungen,
 - AP15: Ableitung von standortbezogenen repräsentativen Materialdaten,
 - AP16: Durchführung von numerischen Simulationen/Qualitäts- und Effizienzüberprüfung,
 - AP17: Validierung von physikalischer Modellierung und numerischer Simulation,
 - AP18: Vorstellung und Diskussion der Arbeiten,
 - AP19: Dokumentation der Arbeiten, Generalisierung der Befunde, Abschlussbericht.
- Ergänzte Arbeitspakete im Rahmen der Vorbereitung eines Benchmark-Vergleichs:*
- AP20: Gewinnung von teilnehmenden Organisationen für den Benchmark-Vergleich,
 - AP21: Literaturrecherche in Vorbereitung auf den Benchmark-Vergleich,
 - AP22: Entwicklung von Benchmark-Beispielmodellen,
 - AP23: Dokumentation der Beispielmodelle, Vorstellung der eingesetzten Simulatoren.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1/4: Vertiefung des T-Codeverständnisses im Hinblick auf geplante Arbeiten zur Verifizierung und Weiterentwicklung des neu entwickelten FTK-Simulators (z. B. hinsichtlich des hydraulisch transversal-isotropen Strömungsverhaltens).
- AP4: Nacharbeiten (interne Phasenzustandsbeschreibung, geringfügige Codeanpassungen).
- AP15: Auswertung der Ergebnisse der laborativen Untersuchungen.
- AP18: Vorbereitungen mit der GRS Braunschweig im Hinblick auf eine Ergebnisveröffentlichung auf der anstehenden 6. internationalen Konferenz „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“ in Brüssel im März 2015.
- AP19: Fortführung der Dokumentationsarbeiten und des Abschlussberichts, insbesondere zu den durchgeführten T- (Verifikation) und F-T-Zweiphasenflussberechnungen (BDM-B1, Mont Terri).
- AP20: Gewinnung von fünf nationalen und internationalen Organisationen (Kooperationspartnern) für den geplanten Benchmark-Vergleich.
- AP22: Zusammenstellung erster Ideen für Benchmark-Beispielmodelle.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP18: Vorbereitung eines Posters und einer Veröffentlichung in Zusammenarbeit mit der GRS Braunschweig im Rahmen der anstehenden Tonsteinkonferenz in Brüssel.
- AP19/23: Fortführung der Dokumentationsarbeiten und des Abschlussberichts.
- AP21: Sammlung von Informationen über die am geplanten Benchmark-Vergleich beteiligten Simulatoren der Partnerorganisationen.
- AP22: Ausformulierung der Benchmark-Beispielmodelle, Abstimmung mit den Partnerorganisationen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Czaikowski, O.; Komischke, M.; Lux, K.-H.; Rutenberg, M.; Seeska, R.; Wiczorek, K. (2015): Comparative modelling and simulation of selected in situ measurements performed at URL Mont Terri using FLAC-TOUGH and CODE_BRIGHT. In Vorbereitung.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11051
Vorhabensbezeichnung: Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2011 bis 31.10.2014	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.10.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 183.075,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Röhlig	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziele des Vorhabens sind die Erfassung und gegebenenfalls Weiterentwicklung numerisch effizienter Methoden der Sensitivanalyse. Die numerische Effizienz soll anhand von Testfällen mit Praxisbezug überprüft und bewertet werden. Weiterhin ist geplant, methodische Grundlagen zur Sensitivanalyse bei zeitabhängigen Simulationsergebnissen zu erarbeiten sowie die Wirkungsweise von Metamodellen und deren Potential hinsichtlich einer Verbesserung der numerischen Effizienz zu untersuchen.

Das Vorhaben wird in Zusammenarbeit mit der GRS Braunschweig in Anlehnung an das Forschungsvorhaben MOSEL durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Identifizierung numerisch effizienter Methoden zur Sensitivitätsanalyse und Herausarbeitung ihres theoretischen Hintergrunds
- AP2: Definition von Testfällen, bei denen die Überprüfung der numerischen Effizienz im Vordergrund steht
- AP3: Testen, Bewerten und Weiterentwickeln der numerisch effizienten Methoden im Rahmen der AP3 und 4 des Forschungsvorhabens MOSEL (02 E 10941)
- AP4: Theoretische und praktische Untersuchungen zum Einfluss von Zeitabhängigkeiten auf die Sensitivitätsanalyse
- AP5: Untersuchung der Wirkungsweise von Parameter-Transformationen auf die Sensitivitätsanalyse
- AP6: Untersuchung der Steigerungsfähigkeit der numerischen Effizienz durch Verwendung von Metamodellen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Für den Abschlussbericht wurden graphische Auswertungen erstellt bzw. erneuert. Die Ergebnisse des Vorhabens wurden zum 5. IGD-TP Exchange Forum vorgestellt und Schlussfolgerungen zu zukünftigen Forschungen abgeleitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Nach Ende der Projektlaufzeit wird der Abschlussbericht fertig gestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kuhlmann, S., Röhlig, K.-J., & Plischke, E. (2013): First results from the project: Numerical efficiency optimization of Sensitivity Analysis Methods with regard to analysis models of long term safety für nuvlera disposal sites. Proceedings of 3rd US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation (p. 17). Albuquerque, NM: Sandia National Laboratories.

Kuhlmann, S., Plischke, E., Röhlig, K.-J., & Becker, D.-A. (2013): Sensitivity analysis: Theory and practical application in safety cases. The Safety Case for Deep Geological Disposal of Radioactive Waste: 2013 State of the Art (pp. 169-176). Paris: OECD/NEA.

Röhlig, K.-J., Kuhlmann, S., Plischke, E. (2014): Sensitivity Analyses: Theoretical Background, Use in the Safety Case, and Related Research Activities. IGD-TP Exchange Forum n°5 (p. 6). October 28-30th, 2014, Kalmar, Sweden

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11061A
Vorhabensbezeichnung: Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2011 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 842.910,00 EUR	Projektleiter: Dr. Rübel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das verfügbare Instrumentarium für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für hochaktive Abfälle im Tonstein in Deutschland wird überprüft und bewertet. Die Anforderungen an die einzusetzenden Instrumentarien und benötigten Daten werden katalogisiert. Der Katalog behandelt konzeptuelle Modelle, Szenarienanalyse, Bewertung der Wirksamkeit geologischer und technischer Barrieren (Integrität) sowie Bewertung möglicher Freisetzungen. Es wird geprüft, inwieweit adäquate Instrumentarien und Daten vorliegen und wie deren Anwendbarkeit auf der Grundlage vorliegender FuE-Ergebnisse zu bewerten ist. Schwerpunkte und Zielstellungen für ergänzende FuE-Arbeiten werden in Form einer Defizitanalyse formuliert.

Die gemeinsame Bearbeitung durch BGR, GRS und DBE TECHNOLOGY soll eine ausgewogene und vollständige Betrachtung aller Instrumentarien gewährleisten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Geologie der relevanten Tonsteininformationen und zugehöriges Endlagerkonzept
- AP2: Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tonstein in Deutschland
- AP3: FEP-Selektion und Szenarientwicklung
- AP4: Möglichkeit des Nachweises der Sicherheit in der Betriebs- und kontrollierten Nachbetriebsphase
- AP5: Nachweiskonzept und Konsequenzenanalyse für die Langzeitsicherheit von Standorten im Tonstein
- AP6: Berichtswesen
- AP7: Prozessanalysen zur Gasentwicklung und Gasbewegung

GRS ist federführend für das Arbeitspaket 5. Dieses gliedert sich in die Unteraufgaben:

- AP5.1: Erstellung des Nachweiskonzeptes
- AP5.2: Bewertung der Datenlage
- AP5.3: Bewertung des Instrumentariums

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wurden im Berichtszeitraum 11 Arbeitsgespräche mit den drei am Projekt beteiligten Organisationen durchgeführt. Die diskutierten Inhalte betrafen vor allem die Szenarientwicklung für das Endlagerstandortmodell NORD und die FEP für das Endlagerstandortmodell Süd. Die Arbeiten in den Arbeitspaketen waren:

AP1: Diskussion des Endlagerstandortmodells SÜD.

AP2: Fertigstellung des Berichts zur Sicherheits- und Nachweisstrategie.

AP3: Beschreibung des Referenzszenariums und exemplarischer Alternativszenarien für das Endlagerstandortmodell NORD.

Weiterentwicklung der Methodik zur Erstellung des FEP-Katalogs. Beginn der Erstellung von FEP für den FEP-Katalog für das Endlagerstandortmodell SÜD.

AP7: Durchführung von Prozessanalysen zur Gasdruckentwicklung und zum Gastransport im Endlager.

Auf Basis des Endlagerkonzepts für das Endlagerstandortmodell NORD und den durchgeführten Abschätzungen zur Gasproduktion wurde in etwa 15 Rechenfällen die Gasdruckentwicklung und der Gasfluss mit dem Programm TOUGH2 modelliert. Dabei wurden Varianten mit 1D- und 2D-Geometrie berücksichtigt. Bei der 1D-Geometrie wurde ausschließlich das Grubengebäude, bei der 2D-Geometrie auch das Wirtsgestein betrachtet. Die bei der Modellierung des Gastransports im Wirtsgestein beobachteten Effekte werden als nicht realistisch erachtet, sondern auf das eingesetzte Modell und die Ungültigkeit des Zweiphasenflussmodells nach van Genuchten im Wirtsgestein zurückgeführt. Daher wurden die 1D-Rechnungen als aussagekräftiger gewertet.

Aus den durchgeführten Rechenfällen ergibt sich, dass eine Optimierung des Endlagerkonzepts zur Verringerung der maximalen Gasdrücke vor allem durch eine Verringerung der produzierten Gasmenge durch den Einsatz nicht gasbildender Stoffe erreicht werden kann.

Die durchgeführten Arbeiten wurden in einem Beitrag für die Abschlussberichte dokumentiert. Die Arbeiten in AP7 sind damit abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Diskussion der Daten für die Gesteinsparameter am Endlagerstandortmodell SÜD.

AP3: Bearbeitung des FEP-Katalogs für das Endlagerstandortmodell SÜD.

AP5: Diskussion der Datenlage für die Durchführung sicherheitsanalytischer Rechnungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Rübel, A.; Meleshyn, A.: Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweis-konzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT). Sicherheitskonzept und Nachweisstrategie. GRS-338, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2014. ISBN: 978-3-944161-18-1.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11061B
Vorhabensbezeichnung: Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2011 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 774.035,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel dieses Vorhabens ist es, zu prüfen, ob und wie ein Sicherheitsnachweis für ein HAW-Endlager in Tonstein in Deutschland geführt werden kann. Dabei wird zunächst der konzeptionelle Ansatz für einen Sicherheitsnachweis in prinzipieller Anlehnung an das Sicherheits- und Nachweiskonzept für einen Standort im Salz entwickelt, wobei die Methodik zum Nachweis der Integrität der geotechnischen und geologischen Barrieren im Vordergrund steht. Voraussetzung für einen Sicherheitsnachweis ist ein umfassender FEP-Katalog, der auf der Beschreibung der geologischen Gesamtsituation, der geowissenschaftlichen Langzeitprognose, dem Abfallmengengerüst und dem Endlagerkonzept sowie einer Abschätzung aller zukünftig im Endlagersystem zu erwartenden Prozesse basiert, und in dem alle zukünftig relevanten Eigenschaften, Ereignisse und Prozesse beschrieben sind. Es ist daher ein Teilziel, aufbauend auf dem VSG-FEP-Katalog, die FEP zu selektieren bzw. zu ergänzen, die für eine Endlagerung in deutschen Tonsteinformationen relevant sind. Diese sollen für die zwei Referenzregionen in einem FEP-Katalog NORD und einem FEP-Katalog SÜD dokumentiert werden, die dann die Grundlage für die Szenarientwicklung bilden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Geologie der relevanten Tonsteinformationen und zugehöriges Endlagerkonzept
- AP2: Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tonstein in Deutschland
- AP3: FEP-Selektion und Szenarientwicklung
- AP4: Möglichkeit des Nachweises der Sicherheit in der Betriebs- und kontrollierten Nachbetriebsphase
- AP5: Nachweiskonzept und Konsequenzenanalyse für die Langzeitsicherheit von Standorten im Tonstein
- AP6: Berichtswesen

Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für AP2, AP4 und AP6 und bearbeitet im AP1 den Unterpunkt 1.2.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde der Bericht zum Endlagerkonzept sowie Verfüll- und Verschlusskonzept für das Endlagerstandortmodell SÜD fertig gestellt. Das Endlagerkonzept wurde für die Einlagerungsoption horizontale Streckenlagerung entwickelt. Eine vertikale Bohrlochlagerung kommt aufgrund der geringen Mächtigkeit des dortigen Wirtsgesteinshorizontes nicht in Frage. Das zugehörige Behälterkonzept wurde aus der „vorläufigen Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben“ (VSG) sowie dem ERATO-Konzept übernommen und an die gegebenen Verhältnisse angepasst. Zur Planung des Grubengebäudes wurde die im Rahmen des FuE-Vorhabens ERATO erstellte Grubengebäudeplanung ebenfalls entsprechend angepasst.

Basierend auf dem Einlagerungskonzept und der Grubengebäudeplanung wurde ein vorläufiges Verfüll- und Verschlusskonzept entwickelt. Dieses besteht aus den Komponenten Migrationssperren, Streckenverschlüsse und Schachtverschlüsse und stellt insgesamt ein redundantes und diversitäres Verschlussystem dar. Die Konzeption für den Schachtverschluss wurde vereinbarungsgemäß aus Synergiegründen aus dem parallel laufenden FuE-Vorhaben ELSA-II übernommen. Für alle technischen und geotechnischen Barrierekomponenten wurden Anforderungen an deren Funktion und Funktionsdauer definiert. Für die untertägigen Hohlräume wurde ein Versatz- und Verfüllkonzept erstellt, das der unterschiedlichen Art der Hohlräume im Bereich der Strecken und des Infrastrukturbereiches Rechnung trägt.

Im Rahmen des Arbeitspaketes 2 wurden die Arbeiten zur beispielhaften Durchführung eines Integritätsnachweises für eine geotechnische Barriere fortgeführt. Als Beispiel wurde der Verschluss der Einlagerungsbohrlöcher im Endlagerkonzept NORD herangezogen.

Des Weiteren wurde für das Endlagerstandortmodell NORD basierend auf dem zugehörigen FEP-Katalog ein Referenzszenario sowie beispielhafte Alternativszenarien abgeleitet. Mit der Erstellung einer entsprechenden Dokumentation wurde begonnen. Parallel dazu wurde mit der Erstellung eines FEP-Kataloges für das Endlagerstandortmodell SÜD begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fertigstellung der beispielhaften Durchführung eines Integritätsnachweises für einen Bohrlochverschluss im Endlagerstandortmodell NORD.
- Fertigstellung des Berichtes zur Szenarienentwicklung für das Endlagerstandortmodell NORD.
- Fortführung der Erstellung des FEP-Kataloges für die Referenzregion SÜD.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M. & Lommerzheim, A. (2014): Endlagerkonzept sowie Verfüll- und Verschlusskonzept für das Endlagerstandortmodell SÜD, Technischer Bericht, DBE TECHNOLOGY GmbH, Peine.

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11061C
Vorhabensbezeichnung: Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2012 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 568.514,00 EUR	Projektleiter: Mrugalla	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Auf Grundlage des derzeitigen Standes von Wissenschaft und Technik zur HAW-Endlagerung sowie unter Berücksichtigung international bewährter Konzepte für Sicherheitsnachweise in verschiedenen geologischen Formationen wird eine Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tongestein erarbeitet und dessen Anwendbarkeit an jeweils einem generischen Modellstandort für NORD- und Süddeutschland getestet. Eine Differenzen-Betrachtung der beiden Modelle zueinander und zu einem Standort im Wirtsgestein Salz (VSG) wird vorgenommen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Geologie der relevanten Tongesteinsformationen und zugehöriges Endlagerkonzept
 - AP2: Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tongestein (Deutschland)
 - AP3: FEP-Selektion und Szenarienentwicklung
 - AP4: Möglichkeit des Nachweises der Sicherheit in der Betriebs- und kontrollierten Nachbetriebsphase
 - AP5: Nachweiskonzept und Konsequenzenanalyse für die Langzeitsicherheit von Standorten im Tongestein
 - AP6: Berichtswesen
- Die BGR ist federführend für die Arbeitspakete 1 und 3.

Unteraufgaben:

- AP1.1: Kriterien zur Auswahl von Referenzregionen und generischer Endlagerstandorte
- AP1.2: Zusammenstellung der Gesteinseigenschaften; Integritätsuntersuchungen „NORD“ und „SÜD“
- AP1.3: Beschreibung der geologischen Endlagerstandortmodelle „NORD“ und „SÜD“
- AP3.1: Prognose der weiteren geologischen Entwicklung für die Endlagerstandortmodelle „NORD“ und „SÜD“.
- AP3.2: Beschreibung der geologischen FEPs „NORD“ und „SÜD“
- AP3.3: Erarbeitung und Beschreibung der Szenarien „NORD“ und „SÜD“

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1.2: Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten fortgesetzt. Die Gesteinseigenschaften „SÜD“ dienen als zusätzliche Grundlage für die Erstellung der FEP.
- AP1.3: Der Bericht (Modell SÜD) wurde als interne Arbeitsgrundlage für die FEP genutzt. Die Veröffentlichung erfolgt nach dem Abgleich und der Übernahme der Informationen in den FEP-Katalog.
- AP3.1: Die Berichte zur geologischen Langzeitprognose für die Modelle NORD und SÜD wurden fertig gestellt.
- AP3.2: Der FEP-Katalog Bericht (NORD) wurde fertig gestellt. Im Zuge der Weiterentwicklung der Methode werden die Inhalte der geologischen FEP für das Modell SÜD neu zusammengestellt und beschrieben.
- AP3.3: Für das „Referenzszenarium-NORD“ wurden die Beschreibungen der FEP-Ausprägungen mit geologischem Schwerpunkt und die Entwicklungen der Teilsysteme Wirtsgestein sowie Nebengebirge fertig gestellt. Die Beschreibung der geologischen Inhalte für Alternativszenarien erfolgte.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fertigstellung der Berichte zur Unteraufgabe 1.2 und 1.3 (SÜD) nach erfolgter Übernahme der Informationen oder Abgleich mit den FEP.
- Bearbeitung geologischer FEP für das Modell SÜD (3.2).
- Fertigstellung des Szenarienberichts (3.3, NORD). Überprüfung und eventuelle Anpassung der Methode zur Szenarienentwicklung „SÜD“ aufgrund der erweiterten Beschreibung der FEP.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Mrugalla, S. (2014): Projekt AnSichT – Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein. Geowissenschaftliche Langzeitprognose für Norddeutschland – ohne Endlagereinfluss. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Ergebnisbericht: 189 S.; Hannover.

Stark, L. (2014): Projekt AnSichT – Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein. Geowissenschaftliche Langzeitprognose für Süddeutschland – ohne Endlagereinfluss. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Ergebnisbericht: 152 S.; Hannover.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11062A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d ³ f und r ³ t (H-DUR)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2012 bis 31.08.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.179.070,00 EUR	Projektleiter: Schneider	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen d³f und r³t stehen Werkzeuge zur Modellierung der Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien (Projekte GRUPRO bzw. TRAPRO) mit expliziter Berücksichtigung von Klüften und Kluftsystemen zur Verfügung (E-DuR). Mehrskalensätze ermöglichen ihre Anwendung auf dichte geklüftet-poröse Gesteine großer geologischer Formationen (A-DuR).

Ziele dieses Projektes sind eine deutliche Beschleunigung und eine wesentlich verbesserte Handhabung der Rechenprogramme d³f und r³t, ein verbesserter Umgang mit Modell- und Parameterungewissheiten sowie die Integration der Codes zu einem einheitlichen Werkzeug. Die Prä- und Postprozessoren werden den erweiterten Anforderungen angepasst. Damit wird die Einsetzbarkeit von d³f und r³t für Langzeitsicherheitsanalysen erheblich verbessert.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Universität Jena (Prof. Attinger) und der Universität Frankfurt (Prof. Wittum) durchgeführt. Das Steinbeis-Forschungszentrum „Technische Simulation“ (Dr. Heisig) ist über einen Unterauftrag eingebunden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete von der GRS bearbeitet:

AP1: Leitung des Vorhabens

AP7: Entwicklung eines umfassenden graphischen Benutzerinterfaces

AP8: Simulation ausgewählter Systeme

AP9: Testrechnungen zur Verifizierung der Neuentwicklungen

AP10: Erstellung des gemeinsamen Abschlussberichtes und Erweiterung der Anwenderhandbücher

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Am 14. November fand das fünfte Projekt-Statusgespräch beim G-CSC in Frankfurt statt. Die Arbeitsgruppen stellten die Ergebnisse ihrer bisherigen Arbeit vor und verständigten sich über das weitere Vorgehen.

Für das geometrische Modell für einen Tracertest im Hard Rock Laboratory Äspö entsprechend der Beschreibung von Task 6 der Task Force on Groundwater Flow and Solute Transport (GWFTS), mit dem u. a. ein Teil der Bilanzierungsmethoden getestet werden soll, wurde ein Rechengitter generiert. Dabei zeigten sich Probleme im Präprozessor.

Mit der Implementierung der im 1. Halbjahr beschriebenen Bilanzierungsmethoden wurde begonnen.

Mehrere Testversionen von UG4 wurden bei der GRS installiert und intensiv getestet. Dabei wurden sowohl die LUA-Skriptsprache als auch das graphische Benutzerinterface benutzt. Die Anforderungen an die Skriptsprache und das Benutzerinterface wurden auf Basis dieser Tests im intensiven Austausch mit den Entwicklern abschließend formuliert.

Die neu entwickelten Lösungsverfahren wurden zunächst anhand eines komplexen 2D-Modelles getestet.

Für das Postprocessing werden derzeit die Programme Paraview und Visit getestet.

Konzepte für die Implementierung von Randbedingungen 2. und 3. Art für den oberen Modellrand im Falle des Vorhandenseins einer freien Grundwasseroberfläche wurden erarbeitet und mit den Entwicklern diskutiert. Derzeit befinden sie sich in der Umsetzung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- Das Modell für den Tracertest wird vervollständigt und eine Modellrechnung einschließlich Bilanzierung durchgeführt. Die bei der Modellerstellung identifizierten Probleme mit dem Präprozessor werden beseitigt.
- Die Arbeit an den Randbedingungen und Bilanzierungsmethoden wird abgeschlossen.
- UG4 wird sowohl unter Benutzung der Skriptsprache als auch unter Benutzung des Benutzerinterfaces getestet.
- Die Arbeiten am Benutzerinterface werden abgeschlossen.
- Der gemeinsame Projekt-Abschlussbericht wird erstellt.

Das sechste Statusgespräch wird am 17. Februar 2015 in Frankfurt stattfinden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 11062B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2012 bis 31.08.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 185.266,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Attinger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundvorhabens ist die grundlegende Erweiterung der numerischen Modelle d^3f und r^3t zur Einsetzbarkeit in Langzeitsicherheitsanalysen. Bisher simulierten d^3f und r^3t die Strömungs- und Transportmodellierung von Sedimentgesteinen in heterogenen porösen und geklüftet-porösen Medien.

Strömungs- und Transportmodelle im geologischen Untergrund und deren Vorhersagezuverlässigkeit sind mit Parameterungewissheiten behaftet, da meist zu wenig Informationen oder Messdaten, insbesondere der räumlichen Verteilung von hydraulischen Leitfähigkeiten oder der Porositäten, vorliegen. Vorhersagen sollten daher den Einfluss dieser Ungewissheiten berücksichtigen und die zu entwickelnden Modelle sollten Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die Schadstoffkonzentrationen im Untergrund liefern.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Universität Frankfurt (Prof. Wittum), dem Steinbeis-Forschungszentrum „Technische Simulation“ (Dr. Heisig) und der Gesellschaft für Reaktorsicherheit in Braunschweig (GRS, Frau Schneider) durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens wird folgendes Arbeitspaket von der Arbeitsgruppe Attinger (Universität Jena) bearbeitet:

AP4: Berücksichtigung von Ungewissheiten:

- Generierung räumlich verteilter Zufallsfelder mit bestimmten geologischen Eigenschaften (hydraulische Leitfähigkeiten, Porositäten)
- Simulation von Strömungs- und Schadstofftransportsituationen mittels Monte-Carlo-Simulationen
- Berechnung von Wahrscheinlichkeitsverteilungen von Schadstoffverteilungen mittels der Methode der „filtered probability density functions“
- Lösung der hochdimensionalen Transportgleichung & Vergleich mit Monte-Carlo-Simulationsergebnissen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde der Vergleich zwischen klassischen und fraktalen Leitfähigkeitsfeldern größtenteils abgeschlossen. Im Rahmen dieses Vergleichs wurden notwendige Konsistenzbedingungen aufgestellt, welche erfüllt sein müssen, um Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen mittels Partikeln zu simulieren. Über die Ergebnisse zu den Konsistenzbedingungen wurde eine Veröffentlichung geschrieben /SUC15/.

Des Weiteren wurde eine semi-analytische Lösung für die Transportgleichung der Varianz der mittleren Konzentration hergeleitet und die Transportgleichung wurde mittels eines neuen Mischungsmodells geschlossen. Außerdem wurde ein numerischer Feldgenerator für gefilterte Geschwindigkeitsfelder entwickelt, implementiert und getestet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im weiteren Verlauf des Projekts sollen die Arbeiten innerhalb des Arbeitspaketes 4 „Berücksichtigung von Datenungewissheiten“ abgeschlossen werden. Das beinhaltet, dass das neue Mischungsmodell analysiert und mit dem klassischen Mischungsmodell aus der Turbulenztheorie verglichen werden soll, für welches wir zeigen konnten, dass es in der Grundwassermodellierung nicht funktioniert. Und die numerischen Berechnungen werden auf räumlich gefilterte Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen ausgeweitet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

/SUC15/ Suciu, N., F. A. Radu, S. Attinger, L. Schüller, P. Knabner (2015): A Fokker-Planck approach for probability distributions of species concentrations transported in heterogeneous media, *Journal of Computational and Applied Mathematics* (erscheint demnächst).

Zuwendungsempfänger: Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt		Förderkennzeichen: 02 E 11062C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2012 bis 31.05.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 653.031,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Wittum	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziele des Projekts sind eine deutliche Beschleunigung und eine wesentlich verbesserte Handhabung der Rechenprogramme d^3f und r^3t , ein verbesserter Umgang mit Modell- und Parameterungewissheiten sowie die Integration der Codes zu einem einheitlichen Werkzeug. Damit soll die Einsetzbarkeit von d^3f und r^3t für Langzeitsicherheitsanalysen erheblich verbessert werden. Hierzu soll im Projekt die Portierung auf Mehrkern- und Graphikprozessoren (AP2), die Umsetzung eines hochskalierbaren gekoppelten DD (Domain Decomposition)-Mehrgitterlösers (AP3), die Kopplung von d^3f und r^3t (AP5) sowie Löser für hochdimensionale Probleme (AP6) eingebracht werden.

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Das Simulationssystem UG ist weltweit über 380-mal lizenziert. Diese Nutzergemeinde ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse.

Es erfolgt eine Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, dem Department für Umweltinformatik des Helmholtz-Zentrums für Umweltforschung (UFZ), Leipzig und dem Institut für Geowissenschaften der Universität Jena.

Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben der beiden BMBF-Projekte vom 01.10.2006 – 31.03.2011 (FKZ 02 E 10326) und vom 01.10.2008 – 30.09.2012 (FKZ 02 E 10568).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete vom Lehrstuhl Simulation und Modellierung der Universität Frankfurt bearbeitet:

AP2: Portierung auf Mehrkern- und Graphikprozessoren

AP3: Umsetzung eines hochskalierbaren gekoppelten DD-Mehrgitterlösers

AP5: Kopplung von d^3f und r^3t

AP6: Löser für hochdimensionale Probleme

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Portierung auf Mehrkern- und Graphikprozessoren

Das Finite-Volumen-Framework wurde implementiert und getestet, insbesondere die 2-Phasen-Diskretisierung zur effizienten Bestimmung der Besetztheitsstruktur der Matrix.

AP3: Umsetzung eines hochskalierbaren gekoppelten DD-Mehrgitterlösers

Um eine gleichmäßige Verteilung von Mehrgitterhierarchien auf große Prozesszahlen zu gewährleisten, wie sie für die Effizienz darauf aufsetzender paralleler Löser von grundlegender Bedeutung ist, wurde ein neues Partitionierungsschema entwickelt und implementiert. Dieses erlaubt es mittels rekursiver gewichteter Bisektion auf verteilten Gitterhierarchien bei spezieller Berücksichtigung von Kind Elementen eine qualitativ gute Partitionierung dieser Gitter in ver-

gleichsweise geringer Zeit zu erzeugen. Insbesondere werden hierbei hierarchische Verteilung sowie adaptive Gitterhierarchien unterstützt. Die hohe Geschwindigkeit des Verfahrens ist insbesondere im Hinblick auf notwendige Umverteilungen bei adaptiven oder anisotropen Verfeinerungsschemata von Bedeutung. Gleichzeitig wurde eine zugängliche und flexible Schnittstelle für die Lastverteilung im Zuge einer Simulation geschaffen. So kann einheitlich sichergestellt werden, dass ein verteiltes Rechengitter bei geeigneten Voraussetzungen zu jeder Zeit eine gewisse Verteilungsqualität nicht unterschreitet. Die Lastverteilungsschnittstelle ist dabei so aufgebaut, dass unterschiedlichste Partitionierungs- und Gewichtungsschemata einfach ausgetauscht und bei Bedarf problembezogen angepasst werden können.

AP5: Kopplung von d^3f und r^3t

Im Rahmen der Kopplung der Programmpakete d^3f und r^3t wurde damit begonnen ein gemeinsames Steuerungsinterface zu gestalten. Dazu wurde zunächst ein Steuerungsskript entworfen, in dem die relevanten Simulationsparameter übersichtlich eingestellt werden können. Dieses Skript ist für Programmläufe in der Konsole als auch auf Parallelrechnern geeignet. Zudem ist der Entwurf so gestaltet, dass er sich gut zur Umsetzung in der graphischen Oberfläche VRL (Visual Reflection Library) eignet. Bei dem Design wurde spezielles Augenmerk darauf gelegt, dass auch simultane Rechnungen von d^3f (Dichtegetriebene Strömung) mit gleichzeitiger Rechnung des Transports von Spezies (r^3t) ermöglicht werden. Erste Testläufe dieser Kopplung, bei der der Transport der Spezies durch die Darcygeschwindigkeit der Dichteströmung induziert wird, sind erfolgreich abgeschlossen worden. Aktuell wird dieses Interface in enger Abstimmung mit dem Kooperationspartner GRS weiter ausgearbeitet und auf spezielle Bedürfnisse angepasst sowie um Funktionalität erweitert.

AP6: Löser für hochdimensionale Probleme

Die Arbeiten in AP6 wurden entsprechend dem im Antrag angegebenen Zeitplan fortgesetzt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Grillo, A.; Wittum, G.; Tomic, A.; Federico, S.: Mathematics and Mechanics of Solids, first published on January 7, 2014 as DOI: 10.1177/1081286513515265

Grillo, A.; Logashenko, D.; Stichel, S.; Wittum, G.: Comput. Visual. Sci. 15(4):169-190, 2012.

Heppner, I.; Lampe, M.; Naegel, A.; Reiter, S.; Rupp, M.; Vogel, A.; Wittum, G.; In: W. E. Nagel; D.H. Kroener; M.M. Resch (Eds.): High Performance Computing in Science and Engineering '12, 435-449, Springer Berlin Heidelberg 2013.

Hoffer, M.; Poliwoda, C.; Wittum, G.: Comput. Visual. Sci. 16(4):181-192, 2013.

Nägel, A.; Vogel, A.; Wittum, G.: Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. (2014), DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2014.11.041>

Reiter, S.; Logashenko, D.; Grillo, A.; Wittum, G.: Comput. Visual. Sci. 15(4), 209-225, 2012.

Reiter, S.; Vogel, A.; Heppner, I.; Rupp, M.; Wittum, G.: Comput. Visual. Sci. 16(4), 151-164, 2013.

Reiter, S.; Logashenko, D.; Stichel, S.; Wittum, G.; Grillo, A.: IJCSE 9(5/6), 416-432, 2014.

Vogel, A.; Reiter, S.; Rupp, M.; Nägel, A.; Wittum, G.: Comput. Visual. Sci 16(4):181-192, 2013.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11072A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K _d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2012 bis 30.11.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.375.573,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt WEIMAR (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig) dient zur Weiterentwicklung des Smart-K_d-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen, welches im Rahmen des Vorhabens ESTRAL entwickelt und in das Rechenprogramm r^{3t} implementiert wurde. Nach einer Qualifizierung des neuentwickelten Rechenprogramms sollte dieses Konzept so erweitert werden, dass weitere, in natürlichen Systemen wichtige Prozesse berücksichtigt werden. Hierzu zählen die Rückkopplung von Redoxreaktionen und Ionenaustausch- bzw. Sorptionsreaktionen mit verschiedenen Einflussgrößen sowie die Berücksichtigung von Wässern mit sehr hoher Ionenstärke, bei denen der Pitzer-Formalismus anzuwenden ist. Diese Prozesse sollen nun berücksichtigt werden, um die Vorgänge noch realitätsnäher abzubilden und das Programm auf weitere Systeme anwendbar zu machen. Das hier zu entwickelnde Konzept ist sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar und gestattet somit auch einen Wissenstransfer auf andere Forschungsfelder.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Vergleichsrechnungen mit anderem Code
(Qualifizierung des neuen Rechenprogramms, z. B. mit Programmcode PHAST)
- AP2: Implementierung zusätzlicher Prozesse, Komponenten und Einflussgrößen
(Erarbeitung eines aktualisierten konzeptuellen Modells zur Berücksichtigung weiterer wichtiger Prozesse und Einflussgrößen, z. B. Redoxprozesse, höhere Ionenstärken)
- AP3: Laborexperimente
(Sorptions- und Säulenexperimente im Rahmen von Promotionsarbeiten)
- AP4: Erzeugung von SCM-Datensätzen und K_d Wert Matrizen
(Gewinnung thermodynamischer Sorptionsdaten und K_d-Berechnung)
- AP5: Berücksichtigung weiterer externer FEPs
(Umsetzung weiterer FEPs/Szenarien in Strömungs- und Transportmodellen)
- AP6: Anwendungsrechnungen (Strömungs- und Transportrechnungen)
- AP7: Qualitätsmanagement/Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Weiterführung und Dokumentation von Modellrechnungen zu den in AP1 ausgewählten Testfällen.
- AP2: Überarbeitung/Erweiterung des konzeptionellen Modells: Durchführung und Dokumentation von Testrechnungen zum Vergleich der Ionenstärkekorrektur nach Pitzer bzw. nach dem Erweiterten Debye-Hückel-Ansatz. Weiterentwicklung und Dokumentation der expliziten Berücksichtigung von Al. Einführung weitere Konkurrenzkatienen und Liganden.
- AP3: Abschluss der Säulenexperimente mit Quarz und Start der Säulenexperimente mit der Reinmineralphase Orthoklas. Weitere Auswertung von Säulenversuchen mittels PhreeqC, STANMOD.
Untersuchung der Al-Belastung von Probenröhrchen diverser Fabrikate.
- AP5: Sichtung der Berichte zur geologischen Langzeitprognose und des FEP Katalogs zur Vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG); Erarbeitung von Vorschlägen zur Berücksichtigung weiterer Szenarien.
- AP7: Durchführung eines Projekttreffens mit dem Verbundpartner HZDR in Leipzig. Vorstellung von Projektergebnissen auf dem PTKA-Statusgespräch und der Tagung A-TAS (Advanced Techniques in Actinide Spectroscopy).

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weiterführung und Dokumentation von Modellrechnungen zu den in AP1 ausgewählten Testfällen.
- AP2: Erweiterung des konzeptionelles Modells: Vervollständigung der projektspezifischen Datenbasis mit Pitzer-Daten und Entwicklung eines Ansatzes zur Berücksichtigung von Redoxprozessen. Beginn der Implementation des weiterentwickelten Konzepts in das Transportprogramm r^3t .
- AP3: Abschluss der Laborexperimente mit Orthoklas und Muskovit. Parallele, erste Transportmodellierung mittels PhreeqC. Finale Erhebung von Protolysekonstanten für Orthoklas, Muskovit und Quarz auf der Basis neuer Titrationskurven.
Untersuchung der Eu-Wandsorption in Abhängigkeit vom V/M für Experimente mit Muskovit, Orthoklas und Quarz.
Erstellung einer Messroutine für die Al-Analytik und Durchführung erster Batch-Experimente mit Al.
- AP5: Detaillierte Beschreibung weiterer zu berücksichtigender Szenarien.
- AP7: Durchführung weiterer Projekttreffen mit dem Verbundpartner HZDR.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Fricke, J.: Sorption von Europium an Quarz – Batchversuche und geochemische Modellierung. Master Thesis. Technische Universität Braunschweig, Juli 2014.
WEIMAR-Internetseite zum Smart K_d -Konzept: <http://www.smartkd-concept.de/>.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11072B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K _d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2012 bis 30.11.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 589.956,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brendler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt WEIMAR (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig) dient zur Weiterentwicklung des Smart-K_d-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen, welches im Rahmen des Vorhabens ESTRAL entwickelt und in das Rechenprogramm r^{3t} implementiert wurde. Nach einer Qualifizierung des neuentwickelten Rechenprogramms sollte dieses Konzept so erweitert werden, dass weitere, in natürlichen Systemen wichtige Prozesse berücksichtigt werden. Hierzu zählen die Rückkopplung von Redoxreaktionen und Ionenaustausch-, bzw. Sorptionsreaktionen mit verschiedenen Einflussgrößen sowie die Berücksichtigung von Wässern mit sehr hoher Ionenstärke, bei denen der Pitzer-Formalismus angewandt werden sollte. Diese Prozesse sollen nun berücksichtigt werden, um die Vorgänge noch realitätsnäher abzubilden und das Programm auf weitere Systeme anwendbar zu machen. Das hier zu entwickelnde Konzept ist sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar und gestattet somit auch einen Wissenstransfer auf andere Forschungsfelder.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Vergleichsrechnungen mit anderem Code
(Qualifizierung des neuen Rechenprogramms, z. B. mit Programmcode PHAST)
- AP2: Implementierung zusätzlicher Prozesse, Komponenten und Einflussgrößen
(Erarbeitung eines aktualisierten konzeptuellen Modells zur Berücksichtigung weiterer wichtiger Prozesse und Einflussgrößen, z. B. Redoxprozesse, höhere Ionenstärken)
- AP3: Laborexperimente
(Sorptions- und Säulenexperimente im Rahmen von Promotionsarbeiten)
- AP4: Erzeugung von SCM-Datensätzen und K_d Wert Matrizen
(Gewinnung thermodynamischer Sorptionsdaten und K_d-Berechnung)
- AP5: Berücksichtigung weiterer externer FEPs
(Umsetzung weiterer FEPs/Szenarien in Strömungs- und Transportmodellen)
- AP6: Anwendungsrechnungen (Strömungs- und Transportrechnungen)
- AP7: Qualitätsmanagement/Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

- Vergleichende Berechnungen für Extended Debye-Hückel und Pitzer-Datenbasis
- Literaturrecherche, Datenbewertung und Erstellung einer Datenbasis der wässrigen Mn-Spezies
- Erweiterung der Datenbasis bezüglich Fe

AP3:

- Experimente zur Nd(III)-Sorption an Muskovit und Orthoklas
- Experimente zur Np(V)-Sorption an Muskovit und Orthoklas
- TRLFS zur U(VI) Sorption an Orthoklas in Anwesenheit von Ca^{2+} als Konkurrenzion

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2:

- Datenbewertung und Erstellung einer Thermodynamik-Datenbasis der Eu-Festphasen

AP3:

- Experimente zur Np(V)-Sorption an Muskovit und Orthoklas bei höherer Ionenstärke
- Experimente zur Nd(III)-Sorption an Muskovit und Orthoklas bei höherer Ionenstärke

AP4:

- Erzeugung von log K-Werten zur Sorption von U(VI), Np(V) und Nd(III) an Orthoklas und Muskovit

5. Berichte, Veröffentlichungen

Britz, S., Noseck, U., Brendler, V., Durner, W. Zachmann, D.: A wrap up of modeling sorption processes of Eu^{3+} under varying geochemical conditions. TRePro III, workshop, Karlsruhe, Germany, 2014.

Noseck, U., Britz, S., Flügge, J., Mönig, J., Brendler, V., Stockmann, M.: New Methodology for Realistic Integration of Sorption Processes Safety Assessments. WM2014 Conference, Phoenix, Arizona, USA, 2014.

Richter, C.: The influence of naturally occurring microorganisms on the sorption of uranium, presentation at LLNL, 23.6.2014, Livermore, USA.

Richter, C., Großmann, K., Brendler, V.: The Influence of Mineral-Originated Microorganisms on the Sorption of Uranium. Goldschmidt 2014 Conference, Sacramento, USA, 2014.

Richter, C., Fahmy, K.: Investigation of contaminated soil. ISBC Meeting, Lund, Sweden, 2014.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11082	
Vorhabensbezeichnung: Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) Phase II – Generierung von Rissystemen einer Auflockerungszone im Korngrößenmaßstab und Überführung der Ergebnisse auf die Makroebene zur Simulation eines Injektionsvorganges			
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung			
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2012 bis 31.07.2015		Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 713.390,00 EUR		Projektleiter: Dr. Müller	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Der Schwerpunkt in dem Vorhaben VerA Phase II liegt in der Entwicklung einer Modellierungsstrategie, mit dem Ziel, den Injektionsprozess zur Abdichtung der Auflockerungszone rechen-technisch abbilden zu können. Auf dieser Grundlage soll der Nachweis für eine qualitätsgesicherte und dauerhafte Abdichtung der an ein Verschlussbauwerk anliegenden Auflockerungszone erbracht werden.

Üblicherweise werden kontinuumsmechanische Modelle zur Modellierung der Auflockerungszone verwendet. Eine kontinuumsmechanische Beschreibung lässt jedoch eine explizite Darstellung der in der Auflockerungszone vorkommenden Rissysteme nicht zu, da die relevanten Verformungen über ein Mittlungsvolumen homogenisiert werden. Aus diesem Grund wurden in der ersten Phase von VerA Strukturmodelle verwendet, die sich an der Kornstruktur von Steinsalz orientieren, um die auf der Kornebene stattfindenden hydraulischen und mechanischen Prozesse einer Auflockerungszone modellhaft abbilden zu können. In der aktuellen Phase soll dieses Strukturmodell hinsichtlich der Leistungsfähigkeit optimiert werden. Die numerischen Entwicklungsarbeiten sollen durch ein umfassendes Laborprogramm ergänzt werden, um die Modelle zu verifizieren. Anschließend soll ein Transfer der aus den kleinräumigen Modellen abgeleiteten Informationen auf eine größere Ebene erfolgen, mit dem Ziel, die Modellierungen mit der Simulation eines Injektionsprozesses abzuschließen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Weiterentwicklung der Polyederstrukturen
- AP2: Validierung des generellen Verformungsverhaltens von Steinsalz und damit verbundener Bruchprozesse
- AP3: Transfer der kleinräumigen Informationen auf großräumige Modelle
- AP4: Mikrostrukturelle Untersuchungen zum Rissystem einer vergüteten Auflockerungszone
- AP5: Abschließende Untersuchungen zur Langzeitstabilität
- AP6: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.2/AP2.1:

Ziel ist, das mechanische Verformungsverhalten von Steinsalz mit Hilfe von geeigneten Stoffmodellen abzubilden, um realistische Rissssysteme einer Auflockerungszone zu generieren. In einer ersten Phase wurden dazu erfolgreich eine Sensitivitätsanalyse und eine Parameteranpassung durchgeführt, mit dem ein bestmöglicher Abgleich von Simulations- und Laborergebnissen hergestellt werden konnte. Allerdings wurden bisher als Kalibrierungsgrundlage für die Parameteranpassung nur die Labormesskurven des Verformungsverhaltens betrachtet. Neben dem Dehnungsverhalten ist jedoch auch die Betrachtung und Kalibrierung des Bruchverhaltens zwingend notwendig. Im Berichtszeitraum wurde daher im Rahmen einer weiteren Sensitivitätsanalyse damit begonnen, das simulierte Bruchverhalten zu bewerten und durch eine Parameteranpassung mit den durchgeführten akustischen Emissionsmessungen abzugleichen. Aufgrund der großen Anzahl an Rechendurchläufen werden die genannten Kalibrierungssimulationen mit einem alternativen und für diese Aufgabe spezialisierten Rechencode durchgeführt. Ziel ist die Erstellung eines Parametersets zur Weiterverwendung in 3DEC, mit dem das Verformungs- und Bruchverhalten von Steinsalz zur Generierung von Rissbildern einer Auflockerungszone realitätsnah abgebildet werden kann.

AP3.1/AP3.2:

Ziel dieses Arbeitspaketes ist die Erstellung eines Kontinuumsmodells, das aus den Polyederstrukturen abgeleitete Reduktionsfaktoren der Permeabilität beinhaltet. Eine Übertragung der hydraulischen Eigenschaften aus den kleinräumigen Polyedermodellen auf ein Kontinuummodell ist jedoch nur zulässig, wenn sich die hydraulischen Eigenschaften des Rissystems durch einen symmetrischen, positiv definiten Tensor zweiter Stufe beschreiben lassen. Zur Bestimmung dieses hydraulischen Durchlässigkeitstensors wird das kleinräumige Modell in verschiedene Richtungen durchströmt und die sog. gerichtete Permeabilität in Richtung des hydraulischen Gradienten bestimmt. Nach dem Superpositionsprinzip werden linear variierende hydraulische Potentiale an den Modellrändern aufgebracht, um eine beliebige Durchströmungsrichtung zu erzeugen. Die berechneten Permeabilitätswerte der verschiedenen hydraulischen Durchströmungsrichtungen werden in einem Polarkoordinatensystem aufgetragen und es wird überprüft, ob sich die so aufgetragenen Werte durch ein Ellipsoid approximieren lassen. Die Arbeiten zur Entwicklung des hydraulischen Durchlässigkeitstensors wurden im Berichtszeitraum abgeschlossen und der erarbeitete methodische Ansatz wurde erfolgreich an einfachen Modellen validiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.2:

Durchführung weiterführender Sensitivitätsanalysen zum Abgleich von simulierten Bruchbildern mit den in AP2 durchgeführten akustischen Emissionsmessungen.

AP3.1/AP3.2:

Ermittlung des Permeabilitätstensors für komplexe Rissysteme. Dazu soll ein Kontinuummodell erstellt werden, um Spannungsinformationen aus diesem abzuleiten und auf die Polyederstruktur übertragen zu können. Ziel ist die Generierung von Rissystemen einer Auflockerungszone. Anschließend soll mit Hilfe des Permeabilitätstensors überprüft werden, ob die ermittelten hydraulischen Informationen auf einen Kontinuumscode übertragen werden können, um die Modellierungen mit der Simulation eines Injektionsprozesses abzuschließen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11092
Vorhabensbezeichnung: Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 30.09.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 307.098,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Mischo	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es soll eine Grundrezeptur für einen verbesserten Steinsalzversatz vorgeschlagen werden, dessen Gefüge so stabilisiert ist, dass nach dem Einbau ein praktisch 100 %-iger Befüllungsgrad erreicht wird und die Stützwirkung des Versatzes so hoch ist, dass Auflockerungen (Rissbildungen) im umliegenden Gebirge ausgeschlossen werden können. Gleichzeitig soll eine Anfangspermeabilität des Versatzes von $< 10^{-14}$ m² erreicht werden. Die Parameter Verformungswiderstand und Permeabilität sollen sich mit zunehmender Einwirkungszeit der Gebirgskonvergenz verbessern.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Anpassung möglicher Bindemittelsysteme hinsichtlich Mischbarkeit und Benetzung mit Salzgrus

AP2: Möglichkeiten der Polyhalitbildung durch Anpassung der in AP1 untersuchten Rezepturansätze (Institut für Anorganische Chemie)

AP3: Laborversuche zur Bestimmung von Festigkeit, Kriech- und Relaxationsverhalten, Permeabilität und Quellverhalten

AP4: Abschluss Etappe I

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Durch Ermittlung des optimalen Salzbindergehaltes sowie der optimalen Lösungsmenge, konnte eine endgültige GESAV-Rezeptur festgelegt werden (Angabe in Massen-% bezogen auf die Gesamtmasse von Salzgrus und Salzbinder):
- 85 % optimierte Salzgruskörnung
 - 11,15 % Polyhalittrockengemisch bestehend aus 48,14 % $\text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$, 28,91 % K_2SO_4 sowie 22,95 % $\text{MgSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$
 - 3,75 % fünf molale MgCl_2 -Lösung
- AP2: Wiederholungsmessungen im Zeitfenster von 4 Monaten nach deren Herstellung bestätigen, dass die Frühfestigkeit des Salzgrus-Salzbinder-Systems durch eine primäre Syngenit-Kristallisation bewirkt wird. Im Laufe der Zeit bildet sich dann unter Rückgang des Syngenit-Anteils zunehmend Polyhalit. Nach der Rezepturoptimierung besteht der Salzbinder, die Polyhalit-Trockenmischung, nunmehr aus Arkanit (K_2SO_4), Kieserit ($\text{MgSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$) und Stuckgips ($\beta\text{-CaSO}_4 \cdot 0,5 \text{H}_2\text{O}$) sowie MgCl_2 -Lösung.
- AP3: Die Festigkeitseigenschaften wurde für 3 verschiedene Einbaudichten (Einbaudichte = 1,5; 1,6 und 1,7 g/cm^3) mit einem Bindemittelgehalt von 15 Massen-% mittels direkten Schertest bei unterschiedlichen Normalspannungen untersucht. Die erhaltenen Festigkeitskurven belegen eine systematische Zunahme der Kohäsion mit steigender Dichte, während der Reibungswinkel annähernd mit 33° konstant ist. Der resultierende Reibungswinkel hängt wesentlich von der Salzgrus-Kornverteilung ab. Zur Untersuchung der hydraulischen Eigenschaften wurden für eine entsprechende Serie jeweils die Ausgangspermeabilitäten und -porositäten bestimmt. Dabei zeigte sich, dass der Salzbindergehalt von 15 % bei gleicher Einbaudichte zu einem Porositätsminimum führt, das abhängig von der realisierten Einbaudichte zwischen ca. 22 und 30 % (gaszugänglicher) Porosität variiert. Es wurde eine neue Messapparatur entwickelt, mit der Permeabilitäten $> 10^{-14} \text{ m}^2$ gemessen werden können.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Ermittlung des Festigkeitszuwachses über die Zeit durch Spaltzugversuche. Untersuchung der optimalen Verarbeitung hinsichtlich möglicher Einbringungstechnologien.
- AP3: Isostatische Kurzzeitkompaktionsversuche zur Bestimmung der Transporteigenschaften sowie Kriechversuche mit Probenkörpern verschiedener Einbaudichten. Weitere Schertests zur Ermittlung der Festigkeitseigenschaften.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Becker, S., Gruner, M., Mischo, H.: „Möglichkeiten der Gefügestabilisierung von Salzgrusversatz“ in Bergbau, Zeitschrift für Rohstoffgewinnung, Energie, Umwelt
 Offizielles Organ des RDB e.V.; ISSN-Nr.: 0342-5681, Nr. 9 September 2014, S. 395 - 398

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11102
Vorhabensbezeichnung: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2012 bis 31.12.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.384.329,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Vorhabens werden die wissenschaftlichen Ergebnisse von experimentellen und theoretischen FuE-Vorhaben im Hinblick auf ihre Berücksichtigung in Modellvorstellungen und Modelldaten für Langzeitsicherheitsanalysen ausgewertet. Beantragte und laufende Projekte werden hinsichtlich ihrer Relevanz für die Bewertung der Langzeitsicherheit und die Verwendung in einem Safety Case überprüft.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

TA1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

- Verfolgung und Bewertung internationaler Entwicklungen zu offenen Fragen bei Langzeitsicherheitsnachweisen und Einbringung nationaler Interessen in internationale Aktivitäten.
- Weiterentwicklung methodischer Vorgehensweisen in der Langzeitsicherheitsanalyse bzw. für den Safety Case.
- Diskussion von eigenen und externen Ergebnissen in nationalen Diskussionsforen zur Erarbeitung gemeinsamer Stellungnahmen und Vorgehensweisen zu ausgewählten Themen der Endlagerung in Deutschland.
- Auswertung neuer wissenschaftlicher Ergebnisse und Aufbereitung zur Verwendung in Instrumentarien für Langzeitsicherheitsanalysen.

TA2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

- Entwicklung methodischer Ansätze im Hinblick auf die Abwägung zwischen Sicherheit in der Betriebsphase und Langzeitsicherheit.
- Weiterführende Untersuchungen zur Aufsättigung von Bentonithaltigen Buffermaterialien im Hinblick auf die Aufsättigungsdynamik bei begrenztem Wasserangebot.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TA1:

- Teilnahme an der NEA Conference Constructing Memories, der jährlichen Sitzung der IGSC in Paris mit Vortrag zur Behandlung extremer geologischer Ereignisse im Safety Case und Unterstützung der IGSC-Aktivitäten zu Safety Case Communication und FEP-Database. Das IGSC-Positionspapier zum Thema Gase ist fertig gestellt und auf der NEA Website veröffentlicht.
- Weiterführung der Arbeiten zu einem gemeinsamen FEP-Katalog (inkl. Konzeption einer FEP-Datenbank) und zum Salt Knowledge Archive mit SANDIA. Teilnahme am Deutsch-Amerikanischen Workshop in Santa Fe.
- Erstellung der gemeinsamen Veröffentlichung mit NAGRA zu Radionuklidinventaren in CSD-V Abfällen.
- Teilnahme am Arbeitstreffen zum EU-Projekt CAST in Brüssel.

- Teilnahme an der 79. Sitzung des Arbeitskreises HAW-Produkte.
- Teilnahme an dem MODARIA-Jahrestreffen in Wien.
- Leitung der Working Group zum Thema „Uncertainties“ auf dem 5. EF der IGD-TP.
- Übersicht über Software-Werkzeuge zur Quantifizierung mikrobieller Prozesse in LZSA.

TA2:

- Teilnahme am Meeting der EBS Task Force in Berkeley. Die Arbeiten an dem Bericht zur Bentonitaufsättigung im Rahmen von Task 8 b-d wurden zurückgestellt. Zwischenzeitlich wurde zusätzlich eine Task 8f über die Bewertung der Vorhersagen unter Berücksichtigung der Ergebnisse aus den Nachuntersuchungen eingerichtet. Diesbezügliche Arbeiten werden in den bestehenden Berichtsentswurf eingegliedert.
- Weiterführung des nicht-isothermen Aufsättigungsversuchs. Zwei Tests in konstruktiv verbesserten Zellen über 8 und 16 Wochen ergaben einen stark veränderten Wassergehaltsverlauf mit verbesserter Konsistenz von Wasserzulauf und aufgenommener Wassermenge.
- Weiterführung des isothermen Aufsättigungsversuchs mit eingeschränkter Wasserzufuhr mit allen Versuchsvarianten. Die Charakterisierung der Granitscheiben hinsichtlich Porosität und Permeabilität zeigt, dass die Aufsättigung durch den Äspö-Granit zu viel Zeit benötigt. Beginn von Voruntersuchungen zur alternativen Verwendung von Glassinterplatten.
- Abschluss und Veröffentlichung des Erfahrungsberichts über die Arbeiten am Standort Ruprechtov. Offizielle Präsentation im Ministerium für Industrie und Handel in Prag.

4. Geplante Weiterarbeiten

TA1:

- Teilnahme an der RWMC-Sitzung, dem Treffen der NEA Initiative „Preservation of Records, Knowledge and Memory (RK&M)“, dem NAWG Workshop und dem nächsten Modaria-Treffen. Weiterführung der IGSC-Aktivitäten.
- Weiterführung der Arbeiten zu einem gemeinsamen FEP-Katalog und zum Salt Knowledge Archive mit SANDIA, Konzeption und Erstellung eines Berichtes zu sicherheitsrelevanten Unterschieden zwischen Salz in steiler und Salz in flacher Lagerung.
- Vorstellung der gemeinsamen Arbeit mit NAGRA zu Radionuklidinventaren in CSD-V Abfällen auf dem Symposium „Scientific basis of the nuclear fuel cycle III“ in Lille.
- Erarbeitung eines Synthesekapitels zum Statusbericht mit den Projektpartnern zu Gemeinsamkeiten und Unterschieden in der Behandlung von C-14 in Langzeitsicherheitsanalysen.
- Auswertung und Zusammenstellung der für die Abschätzung des Ausmaßes mikrobieller Prozesse in einem Endlager in Ton notwendigen Parameter.

TA2:

- Teilnahme am nächsten Treffen der EBS Task Force in Barcelona. Wiederholung der nicht-isothermen Aufsättigungsversuche mit längerer Laufzeit. Durchführung der Versuche mit behinderter Wasseraufnahme mit einem geeigneten Ersatzmaterial für den Äspö-Granit.
- Weiterführung der Zusammenstellung und Bewertung von Analoga-Studien in Ton.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Capouet, M.; Noseck, U.; Navarro, M.; Rübel, A.; van Luik, A.; Sillen, X.: Relevance of gases in the post-closure Safety Case. An IGSC Position Paper. OECD/NEA 2014.

Noseck, U, Havlova, V. (eds.): Natural Analogue Study Ruprechtov (CZ). An Experience Report. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-349, Köln.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11122
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 443.525,00 EUR	Projektleiter: Dr. Herbert	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es soll ein Modell entwickelt und experimentell abgesichert werden, mit dem die veränderliche Permeabilität eines Dichtbauwerks aus Sorelbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen in Salzformationen infolge der Korrosion durch Salzlösungen zeit- und ortsabhängig beschrieben werden kann. Das Modell soll die diffusions- und advektionsbestimmte Korrosion durch die geringpermeable störungsfreie Sorelbeton-Matrix ebenso beschreiben, wie die Korrosion auf Rissen und entlang der Kontaktflächen Dichtbauwerk-Salzgebirge. Das Vorhaben wird in Kooperation mit dem Vorhaben LASA (Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar) der GRS durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Laborversuche
- AP1.1: Herstellung von Sorelbetonproben und von Korrosionslösungen
- AP1.2: Ermittlung von Materialkenngrößen des Sorelbetons mit ungestörter Matrix sowie von gestörten Proben
- AP1.3: Kaskadenversuch: Versuche zur Ermittlung des Reaktionspfades der Korrosion mit NaCl- und IP21-Lösung
- AP1.4: Vorbereitung der Versuchsreihen
- AP1.5: Durchführung der Versuchsreihen
- AP1.6: Probenahme und Messungen
- AP1.7: Auswertung der Messdaten
- AP2: Modelltheoretische Arbeiten
- AP2.1: Bereitstellung der thermodynamischen Daten
- AP2.2: Aufstellung, Test und Anpassung eines reaktiven Stofftransportmodells zur Beschreibung des diffusions- und advektiv bestimmten Lösungsangriffs auf die poröse Matrix von Sorelbeton
- AP2.3: Aufstellung, Test und Anpassung eines reaktiven Stofftransportmodells zur Beschreibung des Lösungsangriffs auf Risse und auf der Kontaktfläche zum Salz
- AP2.4: Programmierarbeiten zur Aufrüstung des Programmpakets OpenGeoSy-Rockflow/ChemApp für die Berechnung der Modelle
- AP3: Simulationsrechnungen
- AP3.1: Geochemische Gleichgewichtsmodellierung der Ergebnisse aus den Kaskadenversuchen
- AP3.2: Nachmodellierung der Versuchsergebnisse aus den Versuchsreihen
- AP4: Dokumentation der Ergebnisse und Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1.3: Die Kaskadenversuche von Sorelbeton mit NaCl-Lösung sowie mit IP21-Lösung wurden bis auf die Analyse der Festkörper mittels XRD abgeschlossen. Nur geringfügige Konzentrationsänderungen konnten beobachtet werden bei der Reaktion von Sorelbeton mit IP21-Lösung, bestätigt durch die begrenzten Dichteänderungen der Eluate. Die Reaktion von Sorelbeton in Kontakt mit NaCl-Lösung zeigt dagegen einen unterschiedlichen Konzentrationsverlauf in Lösung. Hier nimmt die Konzentration von Mg^{2+} in Lösung stetig zu, korrelierend mit der Auflösung der Sorelphasen.
- AP1.4: Zur Bestimmung der Diffusion wurden zunächst die Proben zur Aufsättigung in ungetracerte Lösung gestellt. Anschließend wurden für die Durchführung der Diffusionsversuche jeweils 6 Proben in NaCl-Lösung sowie in IP21 gestellt. Die Untersuchungen werden in wasser- und gasdichten Gefäßen als in-Diffusionsversuche durchgeführt. Die Diffusionsversuche wurden am 14.08.14 begonnen.
Es wurden zylindrische Probekörper aufgeschnitten und mit Gießharz in die Metallzylinder der Permeationsapparatur vergossen. Im Weiteren erfolgte die Permeation mit NaCl- und IP21-Lösung. Aufgrund der hohen Permeabilität der hergestellten Proben wurde zu deren Reduzierung zunächst ein Manteldruck von 30 bar, später dann von 50 bar auf eine der Proben gegeben; es konnte eine Reduzierung der Gas-Permeabilität von ca. 10^{-15} m^2 auf $3 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ erreicht werden, die in dem Zielbereich für die geplanten Durchströmungsversuche liegt. Entsprechend können nun auch weitere Proben präpariert werden können.
- AP1.5: Die Versuche zur Matrixkorrosion wurden begonnen. Die Probekörper wurden hierfür bereits in AP1.1 hergestellt. Aufgrund einer festgestellten Inhomogenität einiger Proben musste zunächst an jeder Einzelprobe die Gaspermeabilität gemessen werden. Zur Bestimmung des advektiven Transportes werden nun die ungestörte Sorelbetonproben in die Permeationsapparatur eingebaut und mit 20 MPa Druck beaufschlagt. Die Probenahme und Ermittlung der Tracerkonzentration über der Zeit erfolgt nach 10 bzw. 20 Monaten.
- AP3.1: Die geochemischen Modellrechnungen zur Ermittlung des Reaktionspfades von Sorelbeton mit NaCl-Lösung und IP21-Lösung wurden durchgeführt (AP2.1) und mit den Ergebnissen des Kaskadenversuches verglichen (s. AP1.3). Es zeigte sich eine gute Übereinstimmung der experimentellen Ergebnisse für die Ionen Na^+ , K^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Cl^- und SO_4^{2-} mit den berechneten Lösungskonzentrationen. Bei der Modellierung des Kaskadenversuches von Sorelbeton mit IP21 wurde Mg-Oxychlorid von Beginn der Reaktion an gebildet, Na und Cl wurden in NaCl gebunden. Für die Reaktion von Sorelbeton mit NaCl-Lösung wurde neben Mg-Oxychlorid noch die Phase Brucit berechnet, in der Mg gebunden ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung der Arbeiten zur Herstellung von Probekörpern mit Schnittflächen (Sorelbeton-Sorelbeton sowie Sorelbeton-Salz) mit definierter Ausgangspermeabilität und Beginn der Korrosionsversuche mit diesen Proben (AP1.4 - AP1.7). Durchführung von Modellierungen des Korrosionsfortschritts und der Permeabilitätsänderungen in der Matrix sowie Fortführung der Arbeiten in AP2.2 - 2.4.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11132
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 491.350,00 EUR	Projektleiter: Dr. Czaikowski	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das von der EU im Rahmen des DOPAS-Projektes zu 50 % co-finanzierte Vorhaben hat die Bereitstellung von Labordaten für die modelltheoretische Analyse des Langzeitdichtvermögens von Verschlussmaterialien im Zusammenwirken mit der Auflockerungszone zum Ziel. Hierzu sind die notwendigen Kenntnisse und Daten zum geomechanischen und geohydraulischen Materialverhalten auf der Grundlage von laborativen Untersuchungen zu ermitteln und im Hinblick auf einen fundierten Nachweis der Langzeitdichtfunktion eines Schachtverschlusskonzeptes für ein Endlager in Salzformationen zur Verfügung zu stellen.

Das Gesamtziel des Vorhabens wird durch unterschiedliche Projektbeiträge erreicht:

- Laboruntersuchungen am Salz-/Sorelbeton und am System Beton/Gebirge,
- Prozessanalytische Modellrechnungen zur Validierung der THM gekoppelten Stoffmodelle und zur Verbesserung des Verständnisses der gekoppelten hydraulisch-mechanischen Prozesse im Schachtverschlussystem.

Das Vorhaben leistet damit einen Beitrag zur sicherheitsanalytischen Bewertung des Langzeitverhaltens von Salzformationen als Endlagerwirtsgestein.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Laborative Untersuchungen zum Verhalten des verfestigten Salz-/Sorelbetons in Triaxialdruckversuchen mit Ermittlung des Kompaktionsverhaltens, der Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung, der Dilatanz- bzw. Festigkeitsgrenze. Zusätzlich soll das langzeitige mechanische und hydraulische Verhalten in ein-/triaxialen Kriechversuchen ermittelt werden. Durchführung weiterer Untersuchungen zur Bestimmung des HM Verhaltens des Systems Beton/Gebirge.

AP2: Prozessanalytische Modellierung: Auswahl geeigneter Stoffmodelle und Materialdaten, Nachprüfung der Anwendbarkeit der Salzmodelle für Salz-/Sorelbeton, Bestimmung der Stoffmodellparameter aus den Laborversuchen, Kalibrierung und Validierung der ausgewählten Stoffmodelle durch Simulation typischer Laborversuche. Durchführung einer HM gekoppelten Modellrechnungen zur Prognose des Langzeitverhaltens eines Schachtverschlussystems im Salinar.

AP3: Ergebniszusammenführung und Berichterstattung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im 2. Halbjahr 2014 wurden die klassischen einaxialen Kriechversuchen an 5 Proben parallel fortgeführt, bei denen neben der axialen und radialen Deformation zusätzlich die axiale Beanspruchung, die Temperatur sowie die Luftfeuchte aufgezeichnet werden.

Während die 5 Prüfkörper während der ersten und zweiten Laststufe (5 MPa bzw. 10 MPa) ein nahezu identisches zeitabhängiges Deformationsverhalten aufwiesen, bewirkte die dritte Laststeigerung auf 20 MPa augenscheinlich eine Veränderung im rheologischen Verhalten der einzelnen Prüfkörper und führte zu einer breiten Streuung der Messwerte.

Die modelltheoretische Analyse mit einheitlichen Stoffmodellparametern lieferte keine zufriedenstellende Übereinstimmung mit den Messwerten. Vielmehr mussten die verwendeten Materialparameter soweit angepasst werden, dass für die ersten beiden Laststufen ein anderer Parameterdatensatz verwendet wurde als für die dritte Laststufe. Es wird angenommen, dass dieser Unterschied im zeitabhängigen Deformationsverhalten als Reaktion auf die dritte Laststeigerung auf die lokale Überschreitung der Festigkeit der Zementstruktur zurückgeführt werden kann.

Ergänzend sollen die der GRS vom BfS im vergangenen Jahr zur Verfügung gestellten Sorel-betonproben vom Typ A1 untersucht und den Ergebnisse der Salzbetonproben exemplarisch gegenüber gestellt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung experimenteller Untersuchungen an Salzbetonproben
- Beginn experimenteller Untersuchungen an Sorelbetonproben
- Fortführung modelltheoretischer Untersuchungen, Vergleich mit Messbefunden
- Dokumentation

5. Berichte, Veröffentlichungen

Meyer, T.; Czaikowski, O.: GRS modelling activities within the DOPAS Project. DOPAS WP5 Meeting. 24. September 2014, GRS Berlin, Germany.

Czaikowski, O.; Meyer, T.; Miede, R.: The DOPAS Full-scale Demonstration of Plugs and Seals project and related GRS national RD&D programs – A retrospective view on 24-month of investigations, DAEF 2014 - Key Topics in Deep Geological Disposal. 24.-26. September 2014, GRS Köln, Germany

Czaikowski et al.: Möglichkeiten und Grenzen ausgewählter Verschlusseigenschaften im Labor und ihre Auswirkung auf die Modellierung (Projekt DOPAS). 11. Projektstatusgespräch zu BMWi-geförderten FuE-Projekten bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle. 25.-26. November 2014, bei PTKA-WTE, KIT Campus Nord, Karlsruhe, Germany.

Czaikowski, O.: GRS experimental activities within the DOPAS Project. DOPAS WP3+WP4 Meeting, 09-10. December 2014, SURAO Office Prague, CZ.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11142
Vorhabensbezeichnung: Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 216.801,00 EUR	Projektleiter: Dr. Rübel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben PASS stellt die von der GRS im Rahmen des internationalen Vorhabens „Full Scale Demonstration of Plugs and Seals“ (DOPAS) durchzuführenden Arbeiten in den Tasks 5.2 und 5.3 des Arbeitspakets 5 dar. Das Projekt DOPAS findet im 7. Rahmenprogramm der Europäischen Union statt. Die GRS nimmt daran als maßgeblicher Partner teil und ist Arbeitspaketleiter des Arbeitspakets 5.

Die Arbeiten in PASS beziehen sich vor allem auf die Auswertung der experimentellen Arbeiten und Prozessmodellierungen im Rahmen der Projekte LAVA, LASA und THM-Ton sowie der Arbeiten der internationalen Projektpartner im Projekt DOPAS im Hinblick auf deren Verwertbarkeit zum Nachweis der Langzeitsicherheit.

Die wichtigsten Aspekte dabei sind die

- Identifizierung der für den Langzeitsicherheitsnachweis relevanten Prozesse, die
- Konzeptionierung von Modellen für integrierte Rechenprogramme, die
- Durchführung von integrierten Rechnungen für generische Endlager, die
- Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen zur Bestimmung der Robustheit des Endlagersystems in Bezug auf die geotechnischen Verschlussbauwerke und die
- Identifikation der verbleibenden Unsicherheiten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Verhalten des Verschlusssystems. Dieses Arbeitspaket beinhaltet die Arbeitsschritte: Stand von Wissenschaft und Technik zum Prozessverständnis, Prognose der Prozessabläufe über große Zeiträume und Identifikation relevanter Prozesse

AP2: Konzeptuelle Modelle und Prozessanalyse. Dieses Arbeitspaket beinhaltet die Arbeitsschritte: Review der nationalen und internationalen Standards und Bestimmungen und Entwicklung der konzeptuellen Modelle für die Wirtsgesteinstypen Salz und Tonstein

AP3: Langzeitsicherheitsanalytische Modelle und integrierte Analyse. Dieses Arbeitspaket beinhaltet die Arbeitsschritte: Implementierung, Integrierte Analyse sowie Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

AP4: Projektleitung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Zuarbeit, Kommentierung und Diskussion für die unter der Federführung von SKB durchgeführten Arbeiten im AP2 von DOPAS zum Thema „Designbasis und Kriterien“ der in DOPAS betrachteten Verschlussbauwerke.
- AP2: Fortentwicklung eines erweiterten mathematischen Modells zur Berücksichtigung der Auflockerungszone und der Betonkorrosion bei der langzeitsicherheitlichen Analyse der Wirkungsweise von Schachtverschlusselementen.
- AP3: Durchführung von deterministischen Rechnungen zur Untersuchung des Einflusses der Auflockerungszone um Verschlussbauwerke und der chemischen Alteration von Verschlussbauwerken aus Salzbeton auf den Lösungsfluss. Dokumentation der Ergebnisse. Fertigstellung des DOPAS Deliverable D5.6 „Status report on conceptual and integrated modelling activities“.
- AP4: Teilnahme am DOPAS General Assembly Meeting 24.11.2014 in Paris.
Organisation eines DOPAS WP5-Arbeitstreffens zur Vorstellung der Ergebnisse der Prozessmodellierung der in DOPAS beteiligten Partner.
Organisation des WP5 in DOPAS als Arbeitspaketleiter.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weitere Mitarbeit bei den unter „Durchgeführte Arbeiten“ genannten Arbeiten im AP2 von DOPAS zur Design-Basis.
WP2-Arbeitstreffen zur Diskussion der Ergebnisse und zur Erstellung eines entsprechenden Berichts in Eurajoki im Februar.
- AP2: Analyse der bisher in DOPAS bei den experimentellen Arbeiten erzielten Ergebnisse im Hinblick auf die Kompatibilität mit dem bereits vorhandenen Kenntnisstand bzw. Ermittlung der Notwendigkeit von Erweiterungen am bisherigen konzeptuellen Modell.
- AP3: Erstellung eines ersten Strukturmodells zur Durchführung zukünftiger integrierter Rechnungen auf Basis des Endlager- und Verschlusskonzeptes der VSG.
Beginn der Implementierung der zu berücksichtigenden Prozesse in ein Segmentmodell von LOPOS.
- AP4: Organisation des WP5 in DOPAS als Arbeitspaketleiter.
Durchführung eines WP5 Arbeitstreffens im September.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Rübel, A., Buhmann, D., Kindlein, J.: Full scale demonstration of plugs and seals (DOPAS) Deliverable D5.6 - Status report on conceptual and integrated modelling activities. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3737, 2014.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11152
Vorhabensbezeichnung: Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 297.778,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Eine wesentliche Komponente in Verschlusskonzepten für Schächte ist eine Schottersäule, die durch ihre Setzungsstabilität als Stützelement für aufliegende Dichtelemente dient. Eine Alternative dazu wäre eine Füllsäule aus Salzgrus. Der Vorteil bei der Verwendung von arteigenem Material ist die Tatsache, dass man nicht nur eine Stützsäule hätte, sondern dass man zusätzlich auch von einer langfristigen Dichtwirkung dieser Säule Kredit nehmen kann. Durch die Konvergenz des Gebirges wird das Salzgrus weiter verdichtet und in seiner Durchlässigkeit reduziert. Um das zu erreichen, bedarf es einer bestmöglichen Verdichtbarkeit des arteigenen Materials sowie geeigneter Verdichtungsverfahren. Im Rahmen dieses Vorhabens soll anhand von Modellberechnungen zum einen untersucht werden, bei welcher Korngrößenverteilung eine bestmögliche In-situ-Verdichtbarkeit erreicht werden kann und zum anderen, welche verfahrenstechnischen Maßnahmen im Rahmen von In-situ-Verdichtungsprozessen eine bestmögliche Verdichtung erwarten lassen.

Zu diesem Zweck wird ein Partikelmodell entwickelt, mit dessen Hilfe unterschiedliche Korngrößen- bzw. Kornverteilungen generiert und ein Verdichtungsprozess simuliert werden kann. Es wird untersucht, welche Korngrößenverteilung die bestmögliche Verdichtbarkeit gewährleistet und welchen Einfluss unterschiedliche Verdichtungsverfahren auf das Verdichtungsergebnis haben. Abschließend wird die langfristige Kompaktion des Materials unter In-situ-Spannungsbedingungen simuliert und die Entwicklung relevanter Materialparameter wie z. B. die Porosität charakterisiert.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Materialoptimierung

AP2: Verfahrensoptimierung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die modelltheoretischen Arbeiten in diesem Vorhaben liefern grundlegende Informationen zur Material- und Einbauspezifikation einer Füllsäule als Stütz- und Abdichtkomponente. Es wurde ein Partikelmodell mittels des PFC-Computer Codes entwickelt, mit dessen Hilfe unterschiedliche Partikelverteilungen sowie Kornformen generiert und ein technischer Verdichtungsprozess simuliert werden kann.

Im Berichtszeitraum wurde ein Modell entwickelt, mit dessen Hilfe eine Rüttelverdichtung simuliert werden kann, wie sie in der Praxis mit sogenannten Rüttelplatten erfolgt. In dem Modell wird der Rüttelvorgang über eine horizontale, der Probe aufliegende, Wand mit entsprechend festen Eigenschaften, simuliert. Diese Wand wird mit einer bestimmten Geschwindigkeit (Rüttelfrequenz) mit kleinmaßstäbigen Bewegungen (Amplitude, maximal $2/3$ des minimalen Partikelradius) in negativer und positiver x-Richtung verschoben. Zusätzlich liegt der Wand ein Gewicht (dargestellt durch ein großes schweres Partikel mit einer konstanten Bewegung in negativer y-Richtung) auf, welches das Gewicht des Rüttlers und damit die Auflast auf die Probe simuliert.

Bisherige Ergebnisse der Modellierungen zeigen, dass abhängig von der Kornform und Kornverteilung unterschiedliche Rüttelfrequenzen zu den jeweils besten Verdichtungsergebnissen führen. Die kleinste bisher erreichte Porosität liegt im Bereich von ca. 8,1 %. Im Vergleich unterschiedlicher Materialien zeigt sich, dass leicht verdichtbares Material den besten Verdichtungsgrad bei einer hohen Frequenz hat, während schwerer zu verdichtendes Material am besten mit niedrigen Bewegungsraten verdichtet wird.

Parallel dazu wurden die Arbeiten zur Entwicklung eines Partikelmodells fortgeführt, das in der Lage ist, eine impulsartige Verdichtung zu simulieren. Das Prinzip der Impulsverdichtung (z. B. Vibrationsstampfer) besteht darin, dass ein Stempel impulsartig Belastungen auf eine Platte aufbringt. Diese Platte verbleibt während der Verdichtung ständig auf der Probe, um eine gleichmäßige und effiziente Kraftübertragung zu gewährleisten. Mittels der numerischen Simulation soll zunächst der Verdichtungsgrad in Abhängigkeit von der Verdichtungsenergie ermittelt werden. Die Impulsverdichtung ist dabei von verschiedenen Faktoren abhängig wie Stempelgewicht, Fallhöhe, Impulsgeschwindigkeit, Schlagfrequenz, Anzahl der Impulse und den Materialeigenschaften der zu verdichtenden Probe.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung der Modellentwicklung zur Analyse unterschiedlicher Verdichtungsmethoden (Impulsverdichtung und Rüttelverdichtung) auf den erreichbaren Verdichtungsgrad einer Probe.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11182A
Vorhabensbezeichnung: Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SANToS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 31.01.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 537.700,00 EUR	Projektleiter: Dr. Rübel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen der wissenschaftlich-technischen Zusammenarbeit von in Fragen der Endlagerung zwischen ROSATOM und dem Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) soll im Themengebiet zur „*Sicherheitsanalyse von Endlagern in oberflächennahen Tonformationen in der Nachbetriebsphase*“ die Überprüfung der Datengrundlage und des Instrumentariums zur Durchführung einer Sicherheitsanalyse für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation durchgeführt werden.

Das auf der Grundlage der lokalen russischen geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse entwickelte Endlagerkonzept wird mit den im Rahmen deutscher Forschungsprojekte (z. B. AnSichT) entwickelten Konzepten mit dem Ziel verglichen, ggf. Möglichkeiten zur Optimierung des deutschen Sicherheitsnachweiskonzeptes aufzuzeigen. Die Übertragbarkeit von Erfahrungen, Ergebnissen, Interpretationen und Daten aus dem russischen Konzept auf Deutschland wird geprüft.

Die gemeinsame Bearbeitung durch BGR, GRS und DBE TECHNOLOGY soll eine ausgewogene und vollständige Betrachtung aller Instrumentarien gewährleisten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Projektkoordination

AP2: Review der geologischen Gesamtsituation und ergänzende Gesteinsuntersuchungen

AP3: Systemanalyse

AP4: Verschlusskonzept und Nachweisführung

AP5: Berechnungen zur Radionuklidenausbreitung

AP6: Berichtswesen

GRS ist federführend für das Arbeitspaket 5. Dieses gliedert sich in die Unteraufgaben:

AP5.1: Indikative Berechnungen mit generischen Modellen

AP5.2: Berechnungen mit präzisierten Modellen

AP5.3: Variationsrechnungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die inhaltliche Bearbeitung des Projekts wurde mit dem ersten Projekttreffen im September begonnen. Insgesamt haben im Berichtszeitraum 2 Treffen mit den nationalen Projektpartnern und 1 Treffen mit den russischen Projektpartnern stattgefunden.

- AP1: Planung und Diskussion der möglichen Anknüpfungspunkte der durchzuführenden Arbeiten mit den russischen Projektpartnern.
- AP2: Diskussion der vorliegenden Informationen zur geologischen Situation am Standort Sosnovy Bor.
- AP3: Erstellung einer ersten Liste mit den als relevant erachteten FEP.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Diskussion des geologischen Modells für den Standort Sosnovy Bor.
- AP3: Diskussion der Liste der zu betrachtenden FEP.
Erarbeitung von ersten FEP-Beschreibungen.
- AP5: Erstellung eines geometrischen 2D/3D-Modells auf Basis des geologischen Modells der BGR zur Verwendung in den Simulationsprogrammen d^3f und r^3t zur Modellierung der Grundwasserbewegung und des Schadstofftransports. Beginn der Zusammenstellung der notwendigen Eingangsdaten für die Modellierungen mit d^3f und r^3t .
Zusammenstellung der notwendigen Eingangsdaten für die Modellierungen der Radionuklidenausbreitung mit dem integrierten Modell CLAYPOS.
Diskussion der Modelle und Eingangsdaten mit den russischen Projektpartnern im April 2015 in Braunschweig und Peine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11182B
Vorhabensbezeichnung: Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SANToS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 31.01.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 352.065,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krone	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Von russischer Seite wird zurzeit geprüft, ob ein Endlager in einer diagenetisch überprägten Tonsteinformation errichtet werden kann. Im Rahmen dieses Vorhabens werden sicherheitstechnische Teilaspekte erarbeitet, die zu einem späteren Zeitpunkt zu einer Bewertung von Standorten in Tonformationen beitragen können. Das besondere Interesse an den gemeinsamen Arbeiten ist darin begründet, dass es im Rahmen des Vorhabens auf der Grundlage realer Erkundungsdaten möglich ist, sicherheitsanalytische Instrumentarien zu testen und ihre Übertragbarkeit auf andere Regionen bzw. Standorte zu bewerten.

Es wird ein Review der geologischen Gesamtsituation durchgeführt. Darauf aufbauend soll ein geologisches Standortmodell erstellt werden, das als Grundlage sowohl für die Entwicklung eines Verschlusskonzeptes, als auch für die Prognose der geologischen Langzeitentwicklung dient. Ausgehend von der Strukturierung des FEP-Kataloges, der im FuE-Vorhaben AnSichT erarbeitet wird, soll ein spezifischer FEP-Katalog entworfen und die Prozesse selektiert werden, die für eine Endlagerung in den Tonsteinformationen der zu untersuchenden Region relevant sind. Abschließend soll mittels Berechnungen zur Radionuklidenausbreitung die Isolationswirkung der Gesamtsystems bestehend aus der geologischen und den geotechnischen Barrieren analysiert und bewertet werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektkoordination
- AP2: Review der geologischen Gesamtsituation und ergänzende Gesteinsuntersuchungen
- AP3: Systemanalyse
- AP4: Verschlusskonzept und Nachweisführung
- AP5: Berechnungen zur Radionuklidenausbreitung
- AP6: Berichtswesen

Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend beteiligt an den Arbeitspaketen 1, 3, 4 und 6.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Auf Grund verschiedener Verzögerungen konnten von russischer Seite die Projektarbeiten noch nicht aufgenommen werden. Die Arbeiten auf deutscher Seite wurden im September aufgenommen.

Die erste Aufgabe bestand darin, die Datengrundlage für die geplanten Arbeiten zu recherchieren und zusammenzustellen. Dies betraf die geologische Situation am geplanten Endlagerstandort, die hydrogeologischen Bedingungen, die thermo-hydro-mechanischen Eigenschaften der Gesteinsformationen und den bisherigen Stand der Planungen bezüglich des Endlagerkonzeptes und der Grubengebäudeplanung.

Als Endlagerhorizont ist der vendische Kotlin Ton in der Leningrader Region vorgesehen. Die bisherigen Planungen für das zu erstellende Grubengebäude sehen vor, eine Rampe in den Endlagerhorizont abzuteufen und über diesen Weg das Grubengebäude aufzufahren. Nach Abschluss der Auffahrungsarbeiten soll diese Rampe wieder verschlossen werden. Die Einlagerung und technische Versorgung des Grubengebäudes soll dann über 3 Schächte erfolgen.

Im September fand ein Treffen mit russischen Kollegen statt auf dem der aktuelle Wissensstand über die thermo-hydro-mechanischen Eigenschaften der dortigen Gesteine sowie deren Retentionsvermögen vorgestellt und diskutiert wurde. In Bezug auf die hydraulische Leitfähigkeit sind ausgeprägte Anisotropien in den Schichten zu beobachten. Für verschiedene Parameter sind auch Abhängigkeiten von der Tiefenlage feststellbar.

Seitens russischer Kollegen wurden auch erste indikative numerische Berechnungsergebnisse vorgestellt, die die Wichtigkeit eines Streckenausbaus in der Formation aufzeigen, da die mechanische Stabilität des Horizontes limitiert ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erarbeitung eines geologischen Modells für den geplanten Endlagerstandort und Integration des derzeitigen Planungsstandes für das Grubengebäude.

Entwicklung eines ersten Entwurfes für ein Verschlusskonzept insbesondere für die Rampe, da diese als erstes verschlossen werden soll.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11193A
Vorhabensbezeichnung: Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2013 bis 31.12.2015		Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.293.954,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Kudla

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben ELSA2 hat folgende Ziele: 1. Entwicklung eines Schachtverschlusskonzeptes als standortunabhängiges Grundkonzept für Salz- und Tonsteinformationen. 2. Test von einzelnen Funktionselementen im Labor und in halbtechnischen Versuchen mit Entwicklung, Test und Kalibrierung von Materialmodellen zur modelltheoretischen Beschreibung des Materialverhaltens für die rechnerische Nachweisführung. Untersuchungsschwerpunkte sind Füllsäulen aus verdichtetem Steinsalz, Kalotten aus Basaltsteinen als Zusatzelemente in setzungsstabilen Schottersäulen, Widerlagerelemente aus MgO-Beton, Weiterentwicklung von Vergütungsverfahren für konturnahe Gebirgsbereiche und Kontaktzone, Weiterentwicklung der Bauausführung und Qualitätskontrolle von Asphalt dichtungen, Zusatzuntersuchungen zum Bentonitdichtelement (z. B. Integration von Äquipotentialsegmenten), Modelltheoretische Analyse von Bauzuständen sowie Belastungs- und Strömungsprozessen. Das Vorhaben ELSA2 entspricht dem Schwerpunkt 3 der Technologie-Plattform (IGD-TP): "Plugging and Sealing".

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse für HAW-Endlager
- AP2: Planung für halbtechnische Versuche in situ
- AP3: Laborversuche zu den Arbeitsschritten 2.1 bis 2.6
- AP4: Halbtechnische Versuche zu den Arbeitsschritten 2.1 bis 2.6
- AP5: Modellierung
- AP6: Berichterstattung

AP1 und AP6 werden gemeinsam mit DBE TECHNOLOGY federführend bearbeitet. Die TU Bergakademie Freiberg ist federführend für AP2 bis AP4. Bei AP5 ist DBE TECHNOLOGY federführend.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Teilberichte liegen als Entwurf vor.

AP2: Planungen abgeschlossen.

AP3: Beginn der Untersuchungen zur Entwicklung einer neuen Asphaltrezeptur. Laboruntersuchungen zu Salzgrus-Versatz weitestgehend abgeschlossen.

AP4: Mit herkömmlicher Verdichtungstechnik (schwere Rüttelplatten) können Restporositäten des Salzgrus-Ton-Gemisches von 15 % erreicht werden.

Fortsetzung der Versuche mit MgO-Ortbeton-Pfropfen und zum Test eines Bentonitdichtelementes mit Äquipotenzialsegmenten. Einbau des Bohrlochversuches BIT-utB-01 (Bitumendichtung "Harte Schale-Weicher Kern").

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Endfassung Bericht.

AP2: Arbeiten abgeschlossen.

AP3: Begleitende Laborversuche zu AP4 (Salzgrus-Tongemisch, Bitumen, Asphalt).

AP4: Versuch zur dynamischen Impulsverdichtung von Salzgrus-Ton-Gemisch in einem Gesenk mit 8,5 m³ Volumen (Termin verschoben).

Einbau von 3 weiteren In-situ-Bohrlochversuchen (Bitumen/Asphalt).

5. Berichte, Veröffentlichungen

U. Glaubach: ELSA shaft seal project – phase 2. Vortrag 5th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation, Santa Fe, New Mexico, September 2014.

U. Glaubach, M. Hofmann, M. Gruner, W. Kudla: Clay modified Crushed Salt for Shaft Sealing Elements – material optimization and evaluation in field tests. Key Topics in Deep Geological Disposal – DAEF. Poster P4-02. Köln, September 2014.

M. Gruner, W. Kudla, Ph. Herold, M. Jobmann: Schachtverschlusskonzepte für zukünftige Endlager für hochradioaktive Abfälle für die Wirtsgesteinsoptionen Steinsalz und Ton. 1. Internationales Freiburger Schachtkolloquium, 30.9.-1.10.2014, Tagungsband S. 121- 128.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11193B
Vorhabensbezeichnung: Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2013 bis 31.12.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 597.233,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen dieses Vorhabens sollen allgemein gültige Grundkonzepte für Schachtverschlüsse in Salz- und Tonsteinformationen entwickelt werden. Das Verschlussystem soll modular aufgebaut sein, damit es an unterschiedliche lokale Situationen und Bedingungen angepasst werden kann. Einzelne Funktionselemente eines solchen Verschlusses sollen im Labor und in halbtechnischen Versuchen auf ihre Eignung getestet werden. Um in der Lage zu sein, rechnerische Zuverlässigkeitsnachweise zu führen, sollen Materialmodelle entwickelt und getestet werden, die in der Lage sind, das Materialverhalten adäquat zu beschreiben.

Um die genannten Ziele zu erreichen, werden vielversprechende Funktionselemente, wie eine Füllsäule aus verdichtetem Steinsalz, Basaltsteinkalotten als Zusatzelemente in Schottersäulen und Bitumendichtelemente im Rahmen von Labor- und In-situ-Untersuchungen getestet. Zu Verbesserung der Einbautechnologie werden Verfahren zur Injektion und zur Vergleichmäßigung einer Fluidaufnahme von Abdichtmaterial weiter entwickelt und getestet. Begleitet werden diese Untersuchungen durch modelltheoretische Arbeiten zur Analyse von Bauzuständen sowie Belastungs- und Strömungsprozessen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse für HAW-Endlager
- AP2: Planung für halbtechnische Versuche in situ
- AP3: Laborversuche
- AP4: Halbtechnische Versuche
- AP5: Modellierung
- AP6: Berichte

Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend beteiligt an den Arbeitspaketen 1, 5 und 6.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen des AP1 wurden im Berichtszeitraum die bisherigen Konzeptentwürfe für Schachtverschlüsse im Tonstein in Deutschland weiter entwickelt. Als Referenzgeologien dienten die im FuE-Projekt AnSichT erarbeiteten geologischen Standortmodelle für Regionen in Nord- und Süddeutschland. Die Konzepte wurden im Rahmen eines ersten internen Berichtsentwurfes dokumentiert und dem Projektpartner zur Prüfung übersandt. Nach erfolgter Durchsicht wurden die Konzepte auf einem Arbeitstreffen ausführlich diskutiert. Die Diskussionsergebnisse werden entsprechend in die Dokumentation eingearbeitet.

Die Verschlusskonzepte enthalten jeweils zwei voneinander getrennte Dichtsysteme, die, angepasst an die lithologische Situation, in unterschiedlichen Tiefenlagen platziert und durch eine Verfüllsäule aus setzungsarmem Schottermaterial getrennt sind. Jedes Dichtsystem wiederum besteht aus Dichtelementen unterschiedlicher Materialien sowie Widerlagern zur Lagestabilisierung. Als Dichtmaterialien sind Bentonit und eine Bitumen-Schotter-Mischung oder Gussasphalt vorgesehen. Prinzipiell ist damit die in den Sicherheitsanforderungen aufgestellte Anforderung nach einem redundanten und diversitären Verschlussystem Rechnung getragen.

Im Rahmen des AP5.1 wurde ein Partikel-Modell für einen Schüttversuch mit Hilfe des Particle Flow Codes (PFC2D) entwickelt. Dieses Modell wurde zum Zwecke der Kalibrierung erstellt, um den Schüttversuch, der in analoger Form im Labor der TU Bergakademie Freiberg durchgeführt wurde, nachzurechnen. Im Rahmen dieser Parameterkalibrierung wurde auch eine Sensitivitätsanalyse mit Hilfe des Softwaretools OptiSLang zur Identifizierung der wesentlichen Modellparameter durchgeführt. Nach erfolgreicher Kalibrierung können die „best Design“ Parameter nun zur Simulation einer Erdbeben-induzierten Setzung einer Schottersäule benutzt werden.

Im AP5.3 - Simulation von Bitumen und Asphalt - konnten die Kalibrierungen zum verwendeten Stoffgesetz für dieses Material erfolgreich abgeschlossen werden. Es wurde daraufhin mit der Erstellung eines Modells zur Simulation von Bauzuständen begonnen. Das Modell umfasst einen Abschnitt des Schachtes, in dem eine hohe Bitumen-Schotter-Säule eingebaut wird. Mit dem Modell sollen zunächst die thermischen Auswirkungen während des Einbaus und das mechanische Verhalten des Bitumens simuliert werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterentwicklung und Dokumentation der prinzipiellen Schachtverschlusskonzepte.

AP5: Fortführung der Arbeiten zur rechnerischen Simulation des Materialverhaltens von Bitumen und Asphalt sowie der Setzung einer Schottersäule.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11203A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2013 bis 29.02.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 266.200,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Während der Kenntnisstand zur aquatischen Chemie der Radionuklide mittlerweile große Fortschritte gemacht hat, sind bei der Kolloidproblematik generell noch viele Fragen offen. Die Mechanismen der Kolloidentstehung in einem Endlager sind noch nicht ausreichend verstanden und der kolloidgetragene Radionuklidtransport in einem Endlagersystem ist für ein bestimmtes Szenario derzeit schwer zu quantifizieren. Die Bentonitbarriere gilt in vielen Endlagerkonzepten als eine relevante Kolloidquelle. Je nach den geochemischen Gegebenheiten können kolloidale Tonpartikel aus dem Bentonit freigesetzt werden.

Hauptziel des Vorhabens ist es, ein verbessertes Verständnis der Radionuklid-Kolloid und Kolloid-Gesteinsoberflächen Wechselwirkung und der zugrundeliegenden Mechanismen unter naturnahen Bedingungen am Beispiel geklüfteter Granitsysteme zu erreichen und auf dieser Basis die Relevanz des kolloidgetragenen Radionuklidtransports hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Endlagers in einer Hartgesteinsformation zu bewerten. Darüber hinaus werden generische Aussagen zur Kolloidrelevanz erarbeitet. Der Beitrag des INE konzentriert sich auf experimentelle Arbeiten im Labor und in Untertagelabors sowie die begleitende Erstellung von Strömungs- und Transportmodellen. Die Arbeiten der GRS fokussieren sich auf die Anwendung und Qualifizierung von Rechenprogrammen für die Langzeitsicherheitsanalyse. Im vorliegenden Bericht werden die Arbeiten der GRS beschrieben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (INE)
- AP1.1: Mechanismen der Kolloid-RN-Kluftmineral-Wechselwirkung
- AP1.2: Kolloidgetragene Radionuklid-Migration
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/INE)
- AP2.1: Simulationsrechnungen für weitere CFM Homolog/RN Experimente (GRS)
- AP2.2: Simulationsrechnungen für Mock-Up Test und integriertes CFM Experiment (GRS)
- AP2.3: Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP2.5: Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen im Kristallingestein (INE)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS/INE)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Zusammenstellung und Dokumentation der Ergebnisse von 1D- und 2D-Simulationsrechnungen für das zweite Radionuklidfeldexperiment CFM RUN13-05. Dokumentation zum Transportcode COFRAME (s. Vorhaben ADEMOS) und der damit durchgeführten 1D-Simulationsrechnungen (Doppelporositätsmodell) für das Feld-Dipolexperiment CFM RUN 10-01 zur Veröffentlichung in einer Fachzeitschrift. Zusammenstellung aller aus den Feldexperimenten abgeleiteten Wechselwirkungsparameter für Radionuklide, Kolloide und Kluftfüllmaterial und Vergleich mit den Ergebnissen anderer Modellierer. Ableitung von Parametern und Bandbreiten für die langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen. Weiterführung der langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen für ein Endlager in Granit. Anpassung von Parameterwerten nach Diskussion mit POSIVA, Durchführung weiterer Parametervariationen (auf Basis der Bandbreiten der vorliegenden Ergebnisse aus allen verfügbaren Labor- und Feldexperimenten) und Dokumentation.
- AP3: Durchführung eines Kolorado-e Arbeitstreffens mit Verbundpartner KIT-INE, Vorstellung der Ergebnisse und Diskussion, wie die experimentellen Ergebnisse in die langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen einfließen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Abschließender Vergleich der Ergebnisse der Vorhersagerechnungen für CFM RUN13-05 mit den experimentellen Daten. Überprüfung der Kurvenverläufe und Wiedererhaltungsraten und ggf. Diskussion von Abweichungen und entsprechende Modifikation der Austauschraten von Radionukliden, Kolloiden und Kluftmatrix. Durchführung erster Rechnungen zum im Frühjahr 2014 gestarteten integrierte Experiment mit Freisetzung von Kolloiden und Radionukliden aus einer eingebauten, dotierten Bentonitquelle. Abstimmung der Ergebnisse der langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen für ein Endlager in Granit mit POSIVA. Diskussion des Einflusses der Kolloide auf die Langzeitsicherheit.
- AP3: Veröffentlichung des gemeinsamen Arbeitsberichts (NAGRA). Fertigstellung des gemeinsamen Berichts zu den Ergebnissen der Modellierergruppen. Erstellung einer Veröffentlichung zu den Simulationsergebnissen für die Homolog- und Radionuklidexperimente in einer Fachzeitschrift.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Flügge, J.; Noseck, U.; Schneider, A.; Wolf, J. (2014): Evaluating Radionuclide Transport Through Fractured Media in Long-Term Safety Assessments. 41st International Congress of the International Association of Hydrogeologists. 15-19 September 2014, Marrakech, Morocco.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11203B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2013 bis 29.02.2016		Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.030.253,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Schäfer

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Der Kenntnisstand zur Kolloidproblematik, speziell zur Prognostizierbarkeit des Kolloidquellterms, der Kolloidstabilität und Kolloid- Mineraloberflächen- Wechselwirkung unter Einbezug der Oberflächenrauigkeit hat in den letzten Jahren nicht zuletzt durch das Vorgängerprojekt KOLLORADO-2 sehr große Fortschritte gemacht. Neben der Beschreibung der Kolloidstabilität mittels elektrostatischer Ansätze sind quantitative Daten zur Erosion der Bentonitbarriere generiert worden. Alle Daten zum kolloidgetragenen Radionuklidtransport weisen auf eine starke Abhängigkeit der Kolloidmobilität von der Kluftgeometrie/Oberflächenrauigkeit hin, wobei die vollständige Dissoziation vierwertige Actinide von der Tonkolloidoberfläche nach wie vor eine offene Fragestellung ist. Hauptziel des Anschlussvorhabens ist es weiterhin, das mechanistische Verständnis der Erosion des kompaktierten Bentonits und der Radionuklid-Kolloid Wechselwirkungen unter naturnahen Bedingungen zu verbessern und die Relevanz des kolloidgetragenen Radionuklidtransports hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Endlagers in einer Hartgesteinsformation zu bewerten. Darüber hinaus werden generische Aussagen zur Kolloidrelevanz erarbeitet. Der Beitrag des INE, auf den sich der vorliegende Bericht bezieht, konzentriert sich auf experimentelle Arbeiten im Labor und im Untertagelabor Grimsel sowie die begleitende Erstellung hydraulischer und kleinskalig reaktiver Transport- Modelle. Diese INE Arbeiten sind auch in das EU-Projekt CP BelBaR eingebunden (www.belbar.eu). Die Arbeiten der GRS fokussieren auf die Weiterentwicklung und Anwendung von Rechenprogrammen für die Langzeitsicherheitsanalyse.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (INE)
- AP1.1: Mechanismen der Kolloid-Radionuklid- Kluftmineral Wechselwirkung (INE)
- AP1.2: Kolloidgetragene Radionuklid-Migration (INE)
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/INE)
- AP2.1: Simulationsrechnungen für weitere CFM-Homolog/Radionuklid-Experimente (GRS)
- AP2.2: Simulationsrechnungen für das integrierte CFM Experiment (GRS)
- AP2.3: Bewertung des kolloidgetragenen Radionuklidtransports (GRS)
- AP2.4: Numerische Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen (INE/GRS)
- AP3: Integration der Ergebnisse (Abschlussbericht; Executive Summary) (GRS/INE)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Folgende Arbeiten wurden im Berichtszeitraum durchgeführt:

AP1.1: Um das Hydratations- und Quellverhalten kompaktierten Bentonits besser beschreiben zu können, wurden durch Kationenaustauschreaktionen verschiedene homoionisch belegte Proben hergestellt: Na-Bentonit, Sr-Bentonit und Li-Bentonit. An diesen Proben wurden anschließend umfangreiche Hydratationsversuche in einem Environmental Scanning Electron Microscope (ESEM) durchgeführt, um für definierte relative Luftfeuchtigkeiten das Quellverhalten der Bentonitproben in situ abzubilden und zu quantifizieren. In einem weiteren Schritt wird röntgenographisch die Aufweitung des Smectits entlang der c-Achse in Abhängigkeit von der relativen

Luftfeuchtigkeit untersucht und diese Daten abschließend mit gravimetrischen Wassergehaltsbestimmungen verglichen.

Für die geplanten RN-Bentonitkolloid-Reversibilitätsuntersuchungen wurden die in dem seit Mai 2014 laufenden Erosionsversuch generierten Kolloide in ausreichender Menge durch Filtration und anschließende Re-Dispergierung mittels Ultraschall in das Sorptionsmedium überführt. Das für die Experimente benötigte Grimsel Kluffüllmaterial wurde aufbereitet und charakterisiert. Erste Sorptionsreversibilitätsversuche wurden gestartet, um die Machbarkeit der einzelnen Versuchsschritte zu gewährleisten.

Die Arbeiten zum Kolloidtransport in Fließzellen fokussierten sich auf die Untersuchung des Kolloidanlagerungsverhaltens an natürlichen Mineralphasen. Hierzu wurde die Plexiglas-Unterseite der Fließzelle durch eine Grimsel Granitscheibe ausgetauscht. Es wurden Experimente mit Fluoreszenz-Latexkolloiden (25 nm und 1000 nm) bei pH 5 und 9.7 für verschiedene Fließraten durchgeführt. Post-mortem Untersuchungen der Granitoberfläche mittels Fluoreszenzmikroskopie und Laser Scanning Mikroskopie wurden durchgeführt, um das Anlagerungsverhalten der Kolloide in Abhängigkeit der Mineralrauhigkeit und Mineralogie zu untersuchen. Mittels 3D-Druckertechnik auf Basis von μ CT Daten hergestellte Abbildungen realer Klufftgeometrien stehen mittlerweile für weitere Versuche zur Verfügung.

API.2: Status: Schwerpunkt der Arbeiten im 2. Halbjahr 2014 lag weiterhin auf der begleitenden Analytik und Interpretation erster Proben des „Long term In-situ-Test (LIT)“.

- Das Packersystem mit einem Intervall, bestehend aus kompaktierten Bentonitringen bestückt mit Glasampullen gefüllt mit Radionuklid-gespikter Bentonitpaste, wurde im Mai 2014 installiert und der LIT Versuch somit gestartet. Regelmäßige Probenahmen durch einen in einer Inertgas-Handschuhbox installierten Autosampler sind am INE auf den konservativen Tracer (Amino-G), die Wasserchemie und Radionuklid-Konzentrationen untersucht worden. Der konservative Tracer zeigt einen kontinuierlichen Anstieg der Konzentration und somit einen direkten Kontakt der RN-markierten Probenvials mit der Scherzone. RN Daten werden momentan ausgewertet.
- Die Auswertung des Radionuklidexperiments Run 13-05 bezüglich der Kolloidmessungen via s-Kurven LIBD ist weitgehend abgeschlossen. Weitere Proben aus dem Tailing der Durchbruchkurve des Run 13-05 zur Analyse mittels AMS an VERA (Vienna Environmental Research Accelerator) sind vorbereitet.

AP2.4: Status: Die Arbeiten zur numerischen Simulation der Strömungs- und Transportprozesse der oben aufgeführten Fließzellenexperimente wurden fortgeführt. Die in der Fließzelle verwendete Grimsel Granitscheibe wurde hinsichtlich der Mineralverteilung segmentiert und direkt ins Modell übertragen. Dies ermöglicht eine Verwendung der mittels AFM bestimmten Anlagerungswahrscheinlichkeiten von Kolloiden, in Abhängigkeit der Mineralogie, im Modell zu berücksichtigen. Erste Rechnungen zum Kolloidtransport zeigen eine starke Abhängigkeit der Ergebnisse von den gewählten Randbedingungen (z. B. Art der Injektion).

4. Geplante Weiterarbeiten

API+2: Die geplanten Arbeiten sind im KOLLORADO-e Antrag ausführlich dargelegt und das neue Laborprogramm ist mit GRS abgestimmt. Schwerpunkt des nächsten ½ a wird neben den laufenden Laborversuchen und Modellierungen, vor allem die Probennahme, chemische Charakterisierung und Kolloiddetektion im Rahmen des LIT im Felslabor Grimsel sein.

AP3: Für KOLLORADO-e wird weiterhin auf Publikationen in wissenschaftlichen Zeitschriften mit peer-review Verfahren fokussiert (siehe Berichte & Veröffentlichungen).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Peer-reviewed eingereicht bzw. in Bearbeitung:

Huber, Heck, Truche, Bouby, Brendlé, Hoess, Schäfer (2015): “Radionuclide desorption kinetics on synthetic Zn/Ni-labelled montmorillonite nanoparticles” *Geochim. Cosmochim. Acta*, 148, p. 426-441

Blehschmidt, Lanyon, Kontar, Schlickerieder, Schäfer, Trick, Martin, Steiner, Baik, Iijima, Gylling, Koskinen, Nakata, Whittleston (2015, in review): “Simulating repository hydraulic boundary conditions for in situ colloid migration tests - the Colloid Formation and Migration Project (CFM) at the Grimsel Test Site, Switzerland” *Hydrol. J.*

Schäfer, Lagos, Hauser, Heck, Huber, Geckeis, Degueldre, Kontar, Blehschmidt (2015, to be submitted): „Pu, Np, Am transport under near-natural flow conditions at the Grimsel Test Site (Switzerland)” *ES&T*

Reiche, Noseck, Blehschmidt, Schäfer (2015, in review): „Migration of contaminants in fractured-porous media in the presence of colloids: effects of kinetic interactions” *J. Contam. Hydrol.*

Delavernhe, Steudel, Darbha, Schäfer, Schuhmann, Wöll, Geckeis, Emmerich (2015, in review): „Size and structure - the key to smectite properties.” *Colloids and Surfaces A*

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11213
Vorhabensbezeichnung: Qualifizierung der Rechenprogramme d^3f und r^3t , Kurztitel Quader		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2013 bis 29.02.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 732.700,00 EUR	Projektleiter: Schneider	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen d^3f und r^3t stehen Werkzeuge zur Modellierung der dichteabhängigen Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien (Projekte GRUPRO bzw. TRAPRO) mit expliziter Berücksichtigung von Wärmetransport, Klüften und Kluftsystemen zur Verfügung (E-DuR). Mehrskalensätze ermöglichen ihre Anwendung auf dichte geklüftet-poröse Gesteine großer geologischer Formationen (A-DuR). Ziele eines aktuellen Projektes sind eine deutliche Beschleunigung und verbesserte Handhabung von d^3f und r^3t , ein verbesserter Umgang mit Ungewissheiten sowie die Integration zu einem einheitlichen Werkzeug (H-DuR).

Ziel dieses Projektes ist die Modellierung von Grundwasserströmung und Schadstofftransport für verschiedene reale geologische Situationen und damit die Erhöhung des Vertrauens in die Modellierung großräumiger, heterogener Modellgebiete. Zur Anwendung und Überprüfung der Neuentwicklungen aus dem Projekt E-DuR sollen Modelle mit expliziter Berücksichtigung von Klüften und des Wärmetransportes, Problemstellungen mit freier Oberfläche und Rechnungen mit r^3t , gekoppelt mit PhreeqC bearbeitet werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete von der GRS bearbeitet:

- AP1: Strömung und Transport im Kluftgestein
- AP2: Wärmetransport
- AP3: Freie Grundwasseroberfläche
- AP4: Modellierung des reaktiven Stofftransportes mit r^3t
- AP5: Dokumentation
- AP6: Modellerstellung und Fehlerbehebung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die Zusammenarbeit mit der TF GWFTS wurde fortgesetzt:

Ein Berichtsentwurf über die Arbeiten zur Grundwassermodellierung in Task 8 b–d wurde einem Review unterzogen. Weitere Arbeiten wurden jedoch zurückgestellt, da zwischenzeitlich zusätzlich eine Task 8 f über die Bewertung der Vorhersagen unter Berücksichtigung der Ergebnisse aus den Nachuntersuchungen eingerichtet wurde. Es erscheint daher sinnvoll, diesbezügliche Arbeiten in den bestehenden Berichtsentwurf einzuarbeiten.

Für die Modellierung der thermohydraulischen Strömung um das Prototype Repository in Äspö – eine Teilaufgabe von Task 8 e – wurde ein überarbeitetes geometrisches Modell erstellt, das nunmehr die bekannten deterministischen Klüfte enthält. Ein Problem im Netzgenerator ProMesh verhinderte bislang jedoch den Export in lesbare Eingabedateien. Parallel dazu wurde ein Modell zur Wärmeausbreitung um die Erhitzer des Prototype Repositories auf der Basis des Programms COMSOL erstellt. Somit stehen nun die Daten für den Wärmeeintrag in das Gebirge zur Verfügung, die für eine nicht-isotherme Simulation der Grundwasserströmung erforderlich sind. Zudem lassen sich auch transiente Temperaturprofile für die Modellierung der Bentonitaufsättigung im Rahmen des Projektes WiGru-7 (FKZ 02 E 11102) gewinnen.

AP3: Die Ergebnisse der im Rahmen des FLIN-Benchmarkprojektes zur Entstehung und die Rückbildung einer Süßwasserlinse durchgeführten Vergleichsrechnungen wurden auf der SWIM-Konferenz präsentiert. Dabei konnte d^{3f} die präzisesten Ergebnisse erzielen.

Das vorgesehene 3D-Modell des Ems-Ästuares soll durch ein 3D-Modell der WIPP-site ersetzt werden. Die dafür notwendigen Daten konnten im letzten Quartal von Sandia übernommen und für d^{3f} konvertiert werden.

AP4: Wurde noch nicht bearbeitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

AP1: Fortsetzung der Arbeiten am thermohydraulischen Strömungsmodell für das Prototype Repository in der Vorinstallationsphase.

Teilnahme am Joint-Meeting der Task Force GWFTS in Helsinki.

AP3: Das Beckenmodell für die WIPP-site wird aufgebaut.

AP4: Beginn der Arbeiten am Testfall Cape Cod.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Schneider, A., Stoeckl, L., Wolf, J., Howahr, M., Brand, L.: Density-driven flow modelling using d^{3f}. 23th Salt Water Intrusion Meeting, June 16-20, Husum, Germany, 2014.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11223
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Vorprojekt zur Kalkulation und Qualifizierung der Forschungsarbeiten		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2013 bis 31.07.2014	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.07.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 110.294,37 EUR	Projektleiter: Dr. Düsterloh	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Konstruktion und angebotsbasierende Kalkulation eines Technikumsprüfstandes zur Analyse des mechanischen und hydraulischen Verhaltens von Abdichtungselementen aus Salzschnittblöcken mit Fugenfüllung sowie Durchführung kleinmaßstäblicher Voruntersuchungen zur Herstellung zylindrischer Prüfkörper aus Salzschnittblöcken mit Fugenfüllung.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konstruktion des Technikumsprüfstandes
- AP2: Angebotsbasierende Kalkulation des Technikumsprüfstandes
- AP3: Untersuchungen zur Profilierung von Salzschnittblöcken unter Berücksichtigung eines kreiszylindrischen Schachtquerschnittes, variierter Fugenbreiten und der Vermeidung axial durchschlägiger Fugen
- AP4: Herstellung kleinskaliger Verbundsysteme zur Erprobung der Schleif- und Sägetechniken
- AP5: Voruntersuchungen zur Herstellung von Fugenmaterial aus Salzpaste/Salzschmelze/SVV
- AP6: Berichtsfassung mit Stellungnahme zur technischen Machbarkeit mit Kostenkalkulation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Erstellung des Abschlussberichtes.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11233	
Vorhabensbezeichnung: Status Quo der Lagerung C-14-haltiger Abfälle aus deutschen Hochtemperatur- und Forschungsreaktoren und Strategie (Lösungsansatz) zu deren künftigen Endlagerung (Carbon-ForeSt)			
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2013 bis 31.12.2014		Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 141.583,00 EUR		Projektleiter: Dörr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des Vorhabens ist es, den Graphit/Kohlestein aus den Hochtemperaturreaktoren und der Forschungsreaktoren, der in Deutschland zu entsorgen ist, Mengen- und Aktivitätsmäßig zu erfassen und unter Berücksichtigung der rechtlichen Rahmenbedingungen zur Zwischenlagerung, zum Transport und zur Endlagerung ein geeignetes Konditionierungs- und Verpackungskonzept zu erstellen. Für den Graphit/Kohlestein aus dem THTR 300 und den Forschungsreaktoren sowie den im Porenleichtbeton eingebundenen Kernbrennstoff und Graphitstaub aus dem AVR soll ein Entsorgungskonzept im Hinblick auf eine Einlagerung in das Endlager Konrad erstellt werden. Für den Graphit/Kohlestein des AVR sollte aufgrund des hohen Aktivitätsinventars an C-14 dieser radioaktiven Abfälle die Entsorgung in einem zukünftigen Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle erfolgen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Aktuelle Bestandsaufnahme und Beschreibung des in Hochtemperatur und Forschungsreaktoren verwendeten Graphits/Kohlesteins
- AP2: Beschreibung der rechtlichen Regelungen/Rahmenbedingungen für die Zwischenlagerung, den Transport und der Endlagerung der graphit-/kohlesteinhaltigen Abfälle
- AP3: Abgleich der ermittelten Massen bzw. Aktivitäten des Graphits/Kohlesteins mit den rechtlichen Rahmenbedingungen im Hinblick auf eine mögliche Einlagerung im Endlager Konrad
- AP4: Entwicklung und Beschreibung von möglichen Konditionierungsverfahren und Behälterkonzepten
- AP5: Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP3: Mit dem Abgleich der ermittelten Massen bzw. Aktivitäten des Graphits/Kohlesteins mit den rechtlichen Rahmenbedingungen wurde abgeschlossen. Der Abgleich basierte auf den Ergebnissen der aktuellen Bestandsaufnahme der Inventare des in Deutschland zu entsorgenden Graphits/Kohlsteins (AP1) und der in Deutschland geltenden rechtlichen Rahmenbedingungen für die Zwischenlagerung, den Transport und die Endlagerung (AP2).
- AP4: Basierend auf den Ergebnissen der Arbeitspakete 1 bis 3 erfolgte die Beschreibung von möglichen Konditionierungsverfahren und Verpackungskonzepte für den Graphit aus den THTR 300 und den Forschungsreaktoren sowie dem im Porenleichtbeton eingebundenen Kernbrennstoff und dem Graphitstaub aus dem AVR mit dem Ziel der Einhaltung der Anforderungen aus den Endlagerungsbedingungen Konrad. Für den Graphit/Kohlestein aus dem AVR wurden Konditionierungsverfahren und Behälterkonzepte für eine Einlagerung in einem Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente beschrieben.
- AP5: Der Abschlussbericht des Vorhabens wurde fertig gestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Es ist geplant die Vorhabensergebnisse auf der JK 2016 und auf anderen Tagungen, z. B. KONTEC 2017, zu veröffentlichen.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11243	
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborative und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Rekompaktionsverhalten der EDZ (LASA-EDZ)			
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2013 bis 31.12.2016		Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 952.430,00 EUR		Projektleiter: Dr. Czaikowski	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens LASA-EDZ besteht in der gezielten Bereitstellung von Labordaten für die hydro-mechanisch gekoppelte modelltheoretische Analyse des Langzeitdichtvermögens der Auflockerungszone. Hierzu sind die notwendigen Kenntnisse und Daten zum geomechanischen und geohydraulischen Materialverhalten auf der Grundlage von laborativen Untersuchungen zu ermitteln und im Hinblick auf einen fundierten Nachweis der Langzeitdichtfunktion für ein Endlager in Salzformationen zur Verfügung zu stellen. Das Gesamtziel des Vorhabens wird durch unterschiedliche Projektbeiträge erreicht:

- Laboruntersuchungen zum Langzeitverhalten der EDZ für verschiedene Belastungsszenarien (z. B. trockene Rekompaktion sowie Rekompaktion bei flüssigkeitsgefülltem Porenraum).
- Prozessanalytische Modellrechnungen zur Validierung der THM gekoppelten Stoffmodelle und zur Verbesserung des Verständnisses der gekoppelten hydraulisch-mechanischen Prozesse im Bereich der Auflockerungszone.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelle Untersuchungen zur Gasdurchlässigkeit im Autoklav (IST-Zustand der Proben), Ermittlung der Beziehung zwischen der Gasdurchlässigkeit und Minimalspannung während der Belastung in triaxialen Rekompaktionsversuchen, Ermittlung des Langzeitverhaltens der (trockenen/teilgesättigten) Steinsalzproben, bei Lösungszufluss (drainiert) und unter Lösungsdruck (undrainiert).
- AP2: Prozessanalytische Modellierung: Identifikation der bei Entnahme des Kernmaterials an der Entnahmelokation vorliegender Gebirgsbeanspruchungen, Auswahl geeigneter Stoffmodelle und Bestimmung der Stoffparameter für das HM-Verhalten der Auflockerungszone, Nachprüfung der Anwendbarkeit der bestehenden Salzmodelle bei Rekompaktion unter Feuchteeinfluss, Bestimmung der Stoffparameter aus den GRS-Laborversuchen, Kalibrierung und Validierung der ausgewählten Stoffmodelle durch Simulation typischer Laborversuche.
- AP3: Ergebniszusammenführung und Berichterstattung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Zur Ermittlung des Langzeitverhaltens in Abhängigkeit der Minimalspannung bei Lösungszufluss wurden radial gelochte Steinsalzprüfkörper verwendet, die im Inneren Salzbetonkerne enthalten. Bei den hier verwendeten Steinsalzprobekörpern wurde vor der Präparation als Ausgangswert die Gaspermeabilität in Abhängigkeit der Minimalspannung bestimmt.
- Aus den Messwerten für die Gaspermeabilität kann auf ein unterschiedliches Materialverhalten geschlossen werden:
 - Zum einen zeigen 5 (von 7) untersuchten Proben eine mit steigender Minimalspannung abnehmende Gaspermeabilität bis in sehr gering durchlässige Bereiche mit Zahlenwerten kleiner 10^{-22} m^2 . Hier wird davon ausgegangen, dass sich diese Proben bei einer minimalen Beanspruchung von 5 MPa nahezu gasdicht verhalten.
 - Die Messungen an 2 Proben zeigen jedoch Zahlenwerte für die Gaspermeabilität in Größenbereichen von 10^{-18} m^2 bis 10^{-19} m^2 (B22-2-KK2) bzw. 10^{-19} m^2 bis 10^{-21} m^2 (B21-2-KK3).
- Ob die Differenzen der ermittelten Gaspermeabilitäten auf die unterschiedliche Entnahmetiefe der Prüfkörper in der Bohrung und damit einen unterschiedlichen Schädigungsgrad zurückgeführt werden können, ist noch mit weiteren experimentellen und modelltheoretischen Untersuchungen zu belegen.
- Nach Einbau eines radial gelochten Steinsalzprüfkörpers mit Salzbetonfüllung im Autoklav wurde im Rahmen eines ersten orientierenden Vorversuchs zunächst die Gaspermeabilität des Verbundsystems wiederum in Abhängigkeit der Minimalspannung gemessen. In einem weiteren Schritt wurde dann das verwendete Medium durch eine gesättigte Salzlauge ersetzt und die Lösungspereabilität bestimmt, bevor die Minimalspannung erhöht wurde. Bei einer konstanten Minimalspannung von 15 MPa sollten dann im (mehr)wöchentlichen Abstand weitere Messungen durchgeführt werden.
- Es wurde eine mit der Erhöhung der Minimalspannung einhergehende Reduzierung der Lösungspereabilität auf Werte im Größenbereich von 10^{-18} m^2 ermittelt. Eine Wiederholungsmessung nach einer Woche ergab einen Wert im Größenbereich von 10^{-19} m^2 . Bedauerlicherweise konnte nach einer weiteren Woche kein zusätzlicher Messwert ermittelt werden, da an der Messvorrichtung ausgangsseitig eine Vermischung des Messfluids mit Öl zu erkennen war. Nach dem Ausbau der Probe aus dem Autoklav wurde festgestellt, dass ein Riss in der die Probe umschließenden Gummimanschette für den Ölzutritt verantwortlich war.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung experimenteller Untersuchungen
- Durchführung erster orientierender modelltheoretischer Untersuchungen, Vergleich mit Literaturdaten
- Dokumentation

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11253
Vorhabensbezeichnung: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung – Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 31.12.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 296.744,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Langefeld	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Untersuchungen sollen für Verschlusskonzepte im Bereich der Endlagerung für radioaktive, wärmeentwickelnde Abfälle (HAW) im Steinsalz durchgeführt werden, um die Methodik des Integritätsnachweises zu bereits vorliegenden Konzepten von Verschlussbauwerken durch geeignete In-situ-Testverfahren zu ergänzen. Dabei sollen die Testverfahren als Bausteine im Rahmen eines Integritätsnachweises einzelner Bauwerke zu verstehen sein, der Teil eines gesamten Langzeitsicherheitsnachweises ist.

Die Ergebnisse der Forschungsarbeiten sollen allgemeingültig auf jedwedem Endlager für HAW im Steinsalz nutzbar sein. Dabei wird auch darauf Augenmerk gelegt, dass die Endlagersicherheitsforschung derzeit einer der Themenbereiche ist, welche seitens des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie gefördert wird.

Innerhalb des Abschnittes „Geotechnische Barrieren“ ordnet sich das geplante Vorhaben in folgende Schwerpunkte des Förderkonzeptes ein:

- Konzeption, Bau und Erprobung langzeitsicherer Abschlussbauwerke bzw. deren Komponenten für Endlager im Steinsalz
- Entwicklung von Konzepten für Verschlussysteme im Bereich der Kontakt- und Auflockerungszone mit Nachweis der Barrierewirkung
- Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereichs
- Ingenieurtechnischer Nachweis der Langzeit-Barrierewirkung der geotechnischen Barrieren“

Weiter berühren die durchzuführenden Arbeiten den Themenbereich Systemverhalten und Systembeschreibung (6.2.) Abschnitt Wirtsgestein:

- Untersuchung und Modellierung des geomechanischen, geochemischen und thermohydromechanischen von Steinsalz und Tonsteinen

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Übersicht Verschlusskonzepte
- AP2: Formulierung der Anforderungen
- AP3: Katalog der Vergütungsmedien
- AP4: Strömungstechnische, chemische und rheologische Charakterisierung
- AP5: Berichtslegung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Während des Berichtszeitraums erfolgte eine umfassende Charakterisierung möglicher Vergütungsmedien. Anhand dieser Charakterisierung erfolgte eine Auswahl von 5 Injektionsmedien, die besonders erfolgsversprechend für die Kontaktfugeninjektion erscheinen. Die ausgewählten Injektionsmedien wurden wiederum in zwei Prioritätsklassen unterteilt.

Im Rahmen einer Projektsitzung am 24.11.2014 wurde ein dreiphasiges Versuchsprogramm zur laborativen Charakterisierung und Erprobung der ausgewählten Injektionsmittel abgestimmt. Im Berichtszeitraum erfolgte die Erarbeitung eines detaillierten Versuchsprogrammes für die laborative Charakterisierung der Fluide.

Am 01. Oktober und 24. November fanden Treffen mit den Projektpartnern statt. Die Ziele der Treffen waren die Besprechung des Berichts über die Injektionsmittel, die Auswahl der weiter zu untersuchenden Injektionsmittel sowie die Abstimmung des Versuchsprogramms.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Berichtszeitraum sollen die ersten 2 Phasen des geplanten Versuchsprogramms durchgeführt werden. In der ersten Phase sollen, neben der laborativen Bestimmung mehrerer Parameter der Injektionsfluide, Injektionsversuche an einem niedrig permeablen Sandstein durchgeführt werden. Anschließend erfolgt eine weitere Eingrenzung der verfügbaren Injektionsmittel. In Phase 2 soll im Labormaßstab eine Kontaktfuge erzeugt werden, die anschließend injiziert wird.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11263
Vorhabensbezeichnung: Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 30.09.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 228.114,00 EUR	Projektleiter: Filbert	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des Vorhabens ist es, die Grundlage zum Nachweis der technischen Realisierbarkeit einer Schachtförderanlage mit 175 t Nutzlast (Endlagerung von Transport- und Lagerbehältern, TLB) einschließlich der wesentlichen maschinen- und bergtechnischen Komponenten und Anlagenteile zu schaffen sowie die Grundlagen zu legen, zum Nachweis der Sicherheit des Transportbetriebes, insbesondere unter dem Aspekt des Strahlenschutzes. Die Genehmigungsfähigkeit der Endlagerung von radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen in TLB (z. B. vom Typ CASTOR[®]) bedingt den Nachweis, dass alle Komponenten des Schachttransportes für Nutzlasten von bis zu 175 t und die entsprechenden Überlasten dem Stand der Technik entsprechen. In dem vorliegenden Vorhaben soll die wirtsgesteinsunabhängige Einsetzbarkeit der zu entwickelnden Schachtfördertechnik bis zu einer max. Teufe von 1000 m nachvollziehbar dargestellt werden. Weiterhin werden die zu erwartenden Auswirkungen der Einlagerung von TLB in Ton- bzw. Granitformationen, z. B. hinsichtlich erforderlicher Zwischenlagerzeiten, bewertend beschrieben. Im Rahmen dieses Vorhabens soll der Stand der Technik bei der Durchführung von Störfallanalysen (deterministisch/probabilistisch) unter besonderer Berücksichtigung der Restrisikominimierung ermittelt werden. Dazu sollen die Fortentwicklung der Probabilistischen Sicherheitsanalyse seit 1994, die Übertragbarkeit der Methoden zur PSA für Kernkraftwerke auf die Schachtförderanlage, ein deterministischer Ansatz, internationale Entwicklungen und Maßnahmen zur Restrisikominimierung untersucht werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Ap1: Differenzbetrachtung probabilistische Sicherheitsanalysen (PSA): 1994 vs 2013
- AP2: Übertragbarkeit der Methoden zur PSA für Kernkraftwerke auf Schachtförderanlagen
- AP3: Bewertung eines deterministischen Ansatzes zur Störfallanalyse
- AP4: Internationale Entwicklungen bei Sicherheitsanalysen zur Schachttransporttechnik
- AP5: Maßnahmen zur Restrisikominimierung
- AP6: Berichtswesen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Im Berichtszeitraum wurde im Rahmen des Arbeitspakets 2 (AP2) im Entwurf eine erste Analyse und Bewertung der Übertragbarkeit der Methoden und Werkzeuge zur PSA für Kernkraftwerke auf eine Schachtförderanlage für schwere Lasten bis 175 t durchgeführt.
- Die im ersten Halbjahr durchgeführte Bewertung wurde im zweiten Halbjahr mit der Analyse der Ergebnisse erster Berichtsentwürfe der GRS im Rahmen des Projekts "Fortschrittliche Methoden und Werkzeuge für probabilistische Sicherheitsanalysen (FKZ: RS1198)" ergänzt. Die Analyse konzentrierte sich auf vier Hauptaspekte dieser Weiterentwicklung.
- Im ersten Schritt wurde die Analyse der Übertragbarkeit der Methoden zur PSA Stufe II für Kernkraftwerke auf eine Schachtförderanlage ergänzt. Grundsätzlich ist das Strukturkonzept von Ereignisbäumen zur Beschreibung von Unfallabläufen in Brennelemente-Lagerbecken und die beschriebene Schnittstelle zur PSA der Stufe I sowie die Zusammenfassung der Ergebnisse im Rahmen der Freisetzungskategorien übertragbar. Die PSA Stufe II für Schachtförderanlagen würde die Analyse und Optimierung der Notfallmaßnahmen für die wichtigsten Ereignisabläufe ermöglichen.
- Im Folgenden wurde die Analyse bezüglich der Übertragbarkeit der PSA-Methoden zu Gemeinsam verursachten Ausfällen (GVA) ergänzt. Es zeigt sich, dass die acht Oberseile, die das Heben und das Senken von Lasten in senkrechter Richtung im Schacht ermöglichen, eine Gruppe von Komponenten ist, die im Rahmen der GVA-Analyse der PSA für Schachtförderanlagen berücksichtigt werden sollte. Der Absturz des beladenen Förderkorbes infolge des Versagens von sechs der insgesamt acht Oberseile, zum Beispiel aufgrund von Kabelkorrosion (GVA), ist im Detail zu analysieren.
- Im Vergleich zu Kernkraftwerken sehen die heutigen Designs der Schachtförderanlagen nicht viele redundante und passive Systeme vor, die relevant für die Sicherheit der Anlagen sind. Aus diesem Grund sollen die potentiellen und relevanten GVA-Ereignisse identifiziert werden. Grundsätzlich sind die im Rahmen der PSA für Kernkraftwerke existierenden Komponentenmodelle und Fehlerbaumkonzepte übertragbar.
- Zusammenfassend wurde im AP2-Bericht die Übertragbarkeit der in der PSA Stufe I und Stufe II für Kernkraftwerke verwendeten Methoden und Werkzeuge auf die PSA für Schachtförderanlagen ausgewertet. Die Hauptschwierigkeiten sowie relevanten Aspekte, die im Rahmen der PSA für Schachtförderanlagen berücksichtigt werden müssen, wurden beschrieben. Schließlich wurden mögliche Anpassungen der in der PSA für Kernkraftwerke verwendeten Methoden vorgeschlagen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im 1. Halbjahr (2015) wird die Bearbeitung des AP3 "Bewertung eines deterministischen Ansatzes zur Störfallanalyse", des AP4 "Internationale Entwicklungen bei Sicherheitsanalysen zur Schachttransporttechnik" und des AP5 "Maßnahmen zur Restrisikominimierung" aufgenommen.

Nach Vorlage und Auswertung der weiteren Berichte zu "Fortschrittliche Methoden und Werkzeuge für probabilistische Sicherheitsanalysen" (GRS1198) sind eventuell die Ergebnisse zu AP2 zu überarbeiten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11273
Vorhabensbezeichnung: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Vorprojekt (UMB-V)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2013 bis 31.05.2015	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 93.918,00 EUR	Projektleiter: Dr. Meleshyn	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Ziele des Verbundvorhabens bestehen in der Entwicklung abgesicherter, objektiver Kriterien zur Auswahl geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle. Hauptziel des Vorprojektes ist es zu zeigen, dass neue Vorgehensweisen zur Untersuchung der Wechselwirkungen von Bentoniten mit Lösungen bei erhöhten Temperaturen durchführbar sind und zu messbaren Ergebnissen führen. Konkret soll festgestellt werden, ob Änderungen des Quellvermögens von Bentoniten infolge der Reaktion mit Lösungen bei verschiedenen Temperaturen quantifizierbar sind und ob diese zu messbaren Änderungen der Permeabilität hochkompakter Bentonite führen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Dieser Nachweis soll im Vorprojekt anhand der Untersuchung eines reaktiven Bentonits erfolgen, der mit einer NaCl-Lösung bei 60 ° und 90 °C sieben Monate reagiert hat, erbracht werden. Das durch die Reaktion veränderte Quellvermögen und die dadurch möglicherweise veränderte Permeabilität des Bentonits soll erfasst werden.

Eine Ausweitung dieser Untersuchungen auf ein weiteres Formationswasser und weitere Bentonite sowie die detaillierte Analyse der Ursachen der gemessenen mechanisch-hydraulischen Parameter soll erst im Hauptprojekt mittels mineralogisch-chemischer Untersuchungen der Reaktionsprodukte und mittels quantenmechanischer Modellrechnungen erfolgen. Im Hauptprojekt sollen zudem die Versuche über einen längeren Zeitraum erfolgen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Versuche wurden am 20. Juni 2014 gestartet und werden nach ca. 7 Monaten im Januar 2015 beendet sein. Neben der Versuchsbetreuung wurden keine weiteren Arbeiten im zweiten Halbjahr 2014 durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Die Reaktionen werden bei 60 ° und 90 °C bis zum 20.01.2015 fortgesetzt.
- Der Quelldruck und die Permeabilität des reagierten Bentonits werden nach Ende der vorgesehenen Reaktionszeit erfasst.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11284
Vorhabensbezeichnung: Bentonitaufsättigung in geotechnischen Barrieren im Endlager-Nahfeld (BIGBEN)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2014 bis 30.06.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 627.100,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kröhn	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Dampfdiffusionsmodell stellt die Sorptionsisotherme für Bentonit, die den empirischen Zusammenhang zwischen relativer Luftfeuchtigkeit und Wassergehalt widerspiegelt, eine zentrale Zustandsgleichung dar. Bei der Beschreibung der Isotherme existieren zurzeit noch einige Unklarheiten. Dies betrifft vor allem den Temperatureinfluss auf die Isotherme, der in einem realen Buffersystem dadurch von Bedeutung ist, dass die Wiederaufsättigung in der thermischen Phase der Entwicklung eines Endlagers erfolgt. Die Wärmeentwicklung bewirkt im Inneren des Buffers auch ohne Wasseraufnahme von außen eine erhebliche Feuchtigkeitsumlagerung. Ferner ist noch unklar, welchen Einfluss die Hysterese zwischen Auf- und Entsättigung auf den Prozess der Wiederaufsättigung hat.

Diese Unklarheiten sollen durch Untersuchungen des Feuchteaufnahmevermögens unter Temperatureinfluss an tonhaltigen Dicht-/Versatzmaterialien, die noch genauer festzulegen sind (z. B. Calcigel, MX80, Febex-Material), beseitigt werden. Die ermittelten Ansätze für die Sorptionsisothermen werden im Code VIPER implementiert und deren Einsatzfähigkeit durch Modellrechnungen bestätigt.

Parallel dazu wird eine Rechenfallbibliothek einschließlich Dokumentation erstellt. Damit können nicht nur neue Programmversionen auch anhand älterer Modelle getestet werden. Vor allem erfolgt damit eine Überprüfung der älteren Modelle vor dem Hintergrund des im Laufe der Zeit stetig verbesserten und erweiterten Modellkonzepts.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP1: Bestimmung von temperaturabhängigen Sorptionsisothermen
- AP2: Modellrechnungen mit neuen Sorptionsisothermen
- AP3: Erstellung einer systematischen Rechenfallbibliothek
- AP4: Erstellung des Abschlussberichts

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die für die Versuche erforderlichen Beschaffungen insbesondere von Sensoren (Feuchte und Temperatur), Exsikkatoren und einem großvolumigen temperierbaren Trockenschrank wurden ausgeführt.

Mit einem Vorversuch zur Optimierung der erforderlichen Messdauern und der erzielbaren Messgenauigkeit bei der Feuchtegehaltsbestimmung der Bentonitproben wurde begonnen. Dabei wurden unterschiedliche Probenmengen bei 40 °C und bei 60 °C bei einer Luftfeuchtigkeit von 75 % aufgesättigt und durch wiederholte Gewichtsmessung die dazu erforderliche Zeit ermittelt. Die Luftfeuchtigkeit erreichte die erwarteten 75 % erst nach deutlich mehr als einem Monat. Offenbar war die Verdunstungsgeschwindigkeit an der Oberfläche der NaCl-Lösung in dieser Zeit geringer als das Wasseraufnahmevermögen der Bentonitproben.

Zurzeit wird in gleicher Weise der Desorptionspfad untersucht, indem die nunmehr aufgesättigten Proben bei gleichen Temperaturbedingungen einer Atmosphäre mit 12 % Luftfeuchtigkeit ausgesetzt werden.

Die Modellrechnungen mit neuen Sorptionsisothermen werden mit Vorliegen der ersten Ergebnisse aus AP1 beginnen.

Arbeiten am Code VIPER haben begonnen, um bei einer Entsättigung Daten für die Desorption verarbeiten zu können.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung der Voruntersuchungen zu Messdauer und -genauigkeit
- Fortsetzung der Arbeiten am Code VIPER
- Beginn der Messungen zur Adsorptionsisotherme

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11294
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung technischer Konzepte zur Rückholung von Endlagerbehältern mit wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen aus Endlagern in Salz- und Tongesteinsformationen (ERNESTA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2014 bis 31.01.2017		Berichtszeitraum: 01.08.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 765.469,00 EUR		Projektleiter: Herold

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des Vorhabens ERNESTA ist es, die technische Umsetzung von Rückholungskonzepten weiter zu konkretisieren, sicherheitstechnische Konsequenzen und Auswirkungen der Sicherheitsanforderung „Rückholbarkeit“ auf die Endlagerauslegung weiter vertieft zu untersuchen und die Auswirkungen hinsichtlich Aufwand und Zeitbedarf aufzuzeigen. Die Planungen sollen Grundlagen für eine genehmigungsreife technische Lösung liefern.

In Deutschland ist die Möglichkeit zur Rückholung als Auslegungsanforderung an ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente seit dem Jahr 2010 in den Sicherheitsanforderungen des BMU. Die Erfüllung der Sicherheitsanforderungen ist Genehmigungsvoraussetzung für die Inbetriebnahme des Endlagers. Innerhalb des Vorhabens sollen zunächst allgemeine Fragestellungen zur Umsetzung und Implementierung der Rückholungsforderung für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente beantwortet werden. Im Anschluss erfolgt eine Weiterentwicklung und vertiefende Planung für eine mögliche Rückholung von Endlagerbehältern für das Konzept der Strecken- und Bohrlochlagerung im Salz- und Tongestein. Darüber hinaus werden Arbeitsprogramme zur Realisierung des Nachweises der technischen Machbarkeit für die relevanten Komponenten der Rückholungskonzepte erarbeitet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzeptübergreifende Fragestellungen und grundlegende Untersuchungen
- AP2: Planung von Rückholungskonzepten bei der Endlagerung im Salzgestein
- AP3: Planung von Rückholungskonzepten bei der Endlagerung im Tongestein
- AP4: Erarbeitung eines Umsetzungsplanes zur Durchführung möglicher Demonstrationsversuche
- AP5: Berichtswesen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Es wurden konzeptübergreifende Fragestellungen und grundlegende Untersuchungen zur Rückholung (Strahlenschutz, Bergtechnik, etc.) beantwortet. Dabei wurden folgende Erkenntnisse gewonnen:

Da die Rückholung bisher nicht im AtG verankert ist, konnten keine Aussagen zur Genehmigungssituation eines möglichen Lagers/Zwischenlagers für die zurückgeholten Behälter getroffen werden. Abhängig vom Behälterkonzept und der Genehmigungssituation können die Behälter übertägig entweder zentral oder dezentral gelagert werden. Der weitere Umgang mit den Behältern ist auch von den Gründen, die zur Rückholung führen, abhängig (z. B.: Weiterverwertung des Brennstoffes). Da die Rückholung während der gesamten Betriebszeit durchführbar sein soll, erscheint es zweckmäßig ein Lager/Zwischenlager während dieser Periode bereitzuhalten.

Am Endlagerstandort sollten die Endlagerteile für wärmeentwickelnde und vernachlässigbar wärmeentwickelnde Abfälle sicherheitstechnisch getrennt werden. Damit kann eine Beeinflussung der Langzeitsicherheit durch die Rückholung ausgeschlossen werden. Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung, die zwischen den wärmeentwickelnden Abfällen endgelagert werden können, sind zwar von der Rückholungsanforderung per se ausgenommen. Zur Reduzierung des verbleibenden Inventars und einer möglichst vollständigen Rückholung wird empfohlen, auch diese Abfälle im Zuge einer Rückholung aus dem Endlager zu entfernen.

Der Wärmeeintrag der Abfälle und ausgedienter Brennelemente führte zu einer Erhöhung der Gebirgstemperatur und ungünstigen klimatischen Bedingungen im Grubengebäude. Es wurde festgestellt dass die Beherrschung der Arbeitsbedingungen untertage durch ein geeignetes Bewetterungs- und Kühlkonzept grundsätzlich möglich ist. Kältemaschinen zur Kühlung von Wetterströmen entsprechen dem Stand der Technik im konventionellen Bergbau. Zur Auswahl geeigneter technischer Maßnahmen sind genaue Kenntnisse über die Temperaturverteilung, das Grubengebäude und der Arbeitsabläufe notwendig.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP4: Die Ergebnisse des AP1 sollen in einem Zwischenbericht dokumentiert werden. Der Bericht soll zu Beginn 2015 fertig gestellt werden.

AP2: Für die existierenden Einlagerungsvarianten Bohrloch- und Streckenlagerung im Salzgestein sollen die bestehenden Planungen zur Rückholung analysiert und vertieft bearbeitet werden. Dies beinhaltet eine detaillierte Beschreibung der Betriebsabläufe, eine Beschreibung der notwendigen Maschinenteknik und eine weitere Anpassung der Einlagerungstechnik. Zusätzlich sollen die herrschenden Temperaturen im Endlager und die geomechanische Stabilität der Strecken während der Rückholung beurteilt werden. Die Arbeiten beginnen zunächst mit der Untersuchung der Einlagerungsvariante Streckenlagerung (AP2.1).

5. Berichte, Veröffentlichungen

P. Herold, W. Bollingerfehr, S. Dörr, W. Filbert, Vortrag: Repository Designs and Technical Solutions with a View to Retrievability and Safety Requirements currently effective in Germany, DAEF-Symposium, Köln, September 2014

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11304
Vorhabensbezeichnung: Tonforschung im Untertagelabor Mont-Terri	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2014 bis 30.06.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 497.037,00 EUR	Projektleiter: Wieczorek

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Als Partner im Betreiber-Konsortium führt die GRS seit 1999 im Auftrag des BMWi Forschungsarbeiten im schweizerischen Untertagelabor Mont Terri im Opalinuston durch. Die Arbeiten dienen dem Ziel, das Verständnis der in einem Endlagersystem im Tonstein ablaufenden Prozesse weiterzuentwickeln sowie die Stoffmodelle und numerischen Simulationsprogramme zu qualifizieren. Für diesen Zweck werden auch relevante Daten ermittelt. Die Untersuchungen betreffen vor allem Fragestellungen bezüglich des THM-Verhaltens des Tonsteins, der Auflockerungszone und von tonhaltigen Buffer- bzw. Verschlussmaterialien. Durch die Arbeit in Gemeinschaftsprojekten mit internationalen Partnern wird der Aufwand reduziert und der Erkenntnisgewinn maximiert.

Die Ergebnisse des Projekts werden direkten Einfluss auf die Konzeption und -auslegung eines Endlagers im Tonstein haben und ergänzen damit die Arbeiten des Projekts AnSichT.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: FE Experiment – Porendruckmessungen und Modellrechnungen als Beitrag zum Streckenlagerungsexperiment der NAGRA im 1:1 Maßstab
- AP2: HE-E Experiment – Weiterführung des im Rahmen des EU-Projekts PEBS aufgebauten Erhitzerversuchs im Mikrotunnel (mit NAGRA, ENRESA und BGR)
- AP3: DM-A Experiment – Langzeitverformungsmessung des Tonsteins in einem Bohrloch
- AP4: SB-A Experiment – Untersuchung von Bohrlochabdichtung und Auflockerungszone (mit BGR)
- AP5: DB Experiment – Messung von Porendruckverlauf sowie chemischem und thermischem Potential im ungestörten Tonstein in einem tiefen Bohrloch durch die Opalinuston-Formation (mit Swisstopo, IRSN, NWMO, NAGRA und BGR)
- AP6: LT-A Experiment – Eigenschaften der sandigen Fazies: Modellkalibrierung an Hand von Lannorexperimenten (mit BGR)
- AP7: Technical und Steering Meetings

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Messungen des Porendrucks in der Umgebung des FE-Tunnels dauern an und liefern aussagekräftige Ergebnisse. Die FE-Tunnelauffahrung wurde mit einem axialsymmetrischen Modell und realistischen Abschlägen simuliert, allerdings ist die erforderliche geometrische Vereinfachung problematisch.
- AP2: Der HE-E Versuch wurde störungsfrei weitergeführt. Der Buffer im zentralen und erhitzernahen Bereich ist noch entsättigt. Im Rahmen des Projekts PEBS wurden die im HE-E ablaufenden THM-Prozesse mit CODE_BRIGHT unter Verwendung eines zweidimensionalen Modells (ebener Schnitt) modelliert. Ein 3D-Modell für die Simulation ist in Vorbereitung.
- AP3: Seit 2009 werden mit einer in einem horizontalen Bohrloch eingebauten Dilatometersonde die Langzeitverformung des Bohrlochquerschnitts sowie ergänzend Temperatur und Luftfeuchte gemessen. Mittels mehrerer Minipiezometer im Nahbereich des Dilatometer-Bohrlochs wird der Porendruck gemessen, der die zeitabhängige Verformung beeinflusst. Mit einem 2D-Modell wurden hydraulische Berechnungen durchgeführt, bei denen mit geeigneten Randbedingungen der Porendruck angepasst werden konnte.
- AP4: Im Experiment SB-A wurde die GRS-Instrumentierung durchgeführt und mit den Porendruckmessungen begonnen. Eine Messstelle zeigt nach einer knapp dreiwöchigen Anpassungsphase einen erwarteten Wert von ca. 1.5 MPa, während der Druck bei der anderen Messstelle deutlich niedriger liegt.
- AP5: Im Rahmen des DB Experiments wurde von Dezember 2013 bis Januar 2014 ein 250 m langes geneigtes Bohrloch durch den gesamten Opalinuston und seine Nebengesteine gebohrt. Anschließend wurde eine Multipackersonde (sechs Doppelpacker und ein Einfachpacker im Bohrlochtieftsten) installiert. Von den bisher durchgeführten Messungen an Kernproben und vom Bohrlochlog liegen über den gesamten erschlossenen Gebirgsbereich Daten zu Mineralogie, Korndichte, Trockendichte und Gesamtdichte, Wassergehalt und Sättigung, Porosität, Porengrößenverteilung und spezifischer Oberfläche vor. Mit der Packersonde wird seit Februar 2014 die Entwicklung der Temperatur und des Drucks in den Messintervallen registriert. Innerhalb des Opalinustons liegt ein geothermischer Gradient von etwa 8 °C/100 m vor. Der hydraulische Druck ist im Opalinuston gegenüber dem Druck der Wassersäule deutlich erhöht und fällt in der darunterliegenden Staffelegg-Formation auf diesen zurück.
- AP6: Für das LT-A Experiment wurde von GRS und BGR ein gemeinsames Laborprogramm entwickelt, um das Verheilungsvermögen von Tonsteinen mit geringerem Tonmineralanteil und höheren Anteilen von Sand- und Karbonatkomponenten zu bestimmen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Messungen in den laufenden Experimenten
- THM-Prognose der Aufheizphase im FE Experiment
- 3D-Modellierung des HE-E
- Modellierung der Bohrlochverformung in DM-A mit viskosen Ansätzen (im Projekt THM-Ton wird ein entsprechendes Stoffmodell entwickelt)
- Hydraulische Tests zur Permeabilitätsbestimmung im DB-Bohrloch
- Durchführung von Laborexperimenten an Proben der sandigen und karbonatreichen Fazies und zugehörige Modellierung im LT-A Experiment

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jaeggi, D., C. Nussbaum, P. Bossart, J.-M. Matray, T. Vogt, K. Wiczorek, I. Plischke, E. Sykes (2014): The Opalinus Clay of the Mont Terri rock laboratory on the example of the BDB-1 borehole – lithology, structure, hydrogeology, microstructure, GeoFrankfurt 2014, 21.-24. September 2014, Goethe Universität Frankfurt a.M.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11314
Vorhabensbezeichnung: Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen (KORPHA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2014 bis 30.11.2017	Berichtszeitraum: 01.09.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 558.500,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hagemann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Identifizierung von Behälterkorrosionsphasen, mit denen in einem Endlager in einer norddeutschen Tonformation zu rechnen ist.

Synthese und thermodynamische Charakterisierung von Behälterkorrosionsphasen.

Ableitung des korrosionsdeterminierten Redoxniveaus im Nahfeld eines Endlagers in einer norddeutschen Tonformation und Prüfung der Auswirkung auf den Transport von Radionukliden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Aufbauend auf einer kritischen Bewertung experimenteller Daten zur Korrosion von Behälterstahlmaterialien werden Korrosionsphasen ermittelt, die in einem Endlager in einer norddeutschen Unterkreide-Tonformation auftreten könnten.

Die zuvor identifizierten Korrosionsphasen werden mit verschiedenen Methoden gezielt synthetisiert. Mit den erhaltenen Verbindungen wie auch anderen kommerziell erhältlichen oder von anderen Arbeitsgruppen hergestellten Präparaten werden experimentelle Untersuchungen durchgeführt, um ihre thermodynamische Stabilität zu ermitteln.

Auf Grundlage der Erkenntnisse sowie weiterer bekannter Randbedingungen wird die mögliche Bandbreite des Redoxniveaus in einem Endlager in einer norddeutschen Unterkreide-Tonformation modellhaft ermittelt. Mit Hilfe von Stofftransportmodellen wird gezeigt, wie sich die Variabilität des Redoxniveaus auf die Konzentration der Radionuklide entlang des Ausbreitungspfades im einschlusswirksamen Gebirgsbereich auswirkt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur anaeroben Korrosion von eisenhaltigen Werkstoffen in tiefen norddeutschen Tonformationen (Unterkreideton mit salinaren Porenwässern) liegen bislang keine Untersuchungen vor. Daher wurde zur Ableitung potentieller Korrosionsphasen auf Ergebnisse von Untersuchungen unter ähnlichen Randbedingungen zurückgegriffen. Dieses sind z. B. Forschungsarbeiten zur Korrosion von Eisen in Tonstein oder in Bentonit-Backfill, wie sie z. B. für Endlager-Projekte in der Schweiz, in Frankreich oder in Schweden durchgeführt worden sind. Zusätzlich wurden Ergebnisse herangezogen, die für Standorte in Salzformationen gewonnen wurden (Deutschland sowie USA: WIPP-site).

Die anaerobe Korrosion in schwach mineralisierten Wässern führt, wenn sich hohe pH-Werte entwickeln können, zu Magnetit (Fe_3O_4). Ist der Korrosionskörper hingegen in Bentonit eingehüllt, werden in Anwesenheit eines Carbonats teilweise die Eisen(II)carbonate zu Siderit, Chukanovit oder Ankerit. Zudem diffundieren Fe^{2+} -Ionen in den Ton, wo sie als eisenhaltige Tonminerale gebunden werden (z. B. Greenalit). In einigen Versuchen unterblieb die Bildung von Magnetit und es wurden nur Eisen(II)silikate gefunden. Als weitere Korrosionsphase konnte in einigen Fällen Green Rust (in carbonatischer oder sulfatischer Form) nachgewiesen werden. Bei erhöhten Chlorid-Konzentrationen im Porenwasser wurden Hinweise auf die Bildung von Akaganeit, $\text{FeO}(\text{OH}, \text{Cl})$ gefunden.

Eisen(III)oxyhydroxide sowie Eisen(III)oxide scheinen sich nur in der verhältnismäßig kurzen, einige Jahre bis Jahrzehnte dauernden aeroben Phase zu bilden, also der Zeit bis zum vollständigen Verbrauch des Luftsauerstoffs in der Umgebung des Einlagerungsortes (nach Verschluss der Einlagerungsstrecke oder des Bohrlochs). Besonders in früheren Arbeiten sind Eisen(III)oxyhydroxide als Artefakte zu vermuten, die sich bei Luftkontakt innerhalb von Minuten aus den unter anaeroben Bedingungen gebildeten oxidationsempfindlichen Fe(II)-Mineralen bilden.

Die bisher in Deutschland in konzentrierten Salzlösungen durchgeführten Versuche lieferten bislang kaum Aussagen zu den Korrosionsphasen. Diesbezüglich informativer waren die Untersuchungen für die WIPP (USA). Die dort gefundenen Phasen umfassen Siderit, ein gemischtes Calcium-Eisen(II)-Carbonat, Hibbingit sowie bei Anwesenheit von Schwefelwasserstoff Mackinawit. In magnesiumreichen Lösungen wurden zudem Amakinit sowie ein gemischtes Eisen(II)/Magnesium-oxychlorid gefunden.

Zur Identifizierung potentieller Korrosionsphasen eignen sich auch bestimmte archäologische Artefakte aus Eisen, wenn diese für längere Zeiten (Jahrzehnte bis Jahrhunderte) unter anaeroben Bedingungen gelagert waren. Dann ergeben sich natürliche Analoga für die langfristige Korrosion. Bei Fundstücken aus Böden wurden Siderit und Chukanovit gefunden, bei Fundstücken aus Meerwasser Hibbingit.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss der Identifizierung potentieller Korrosionsphasen und Auswahl zur späteren Synthese sowie Zusammenstellung/Entwicklung von Synthesemethoden und Herstellung von Präparaten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11324
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung eines chemisch-hydraulischen Modells für die Prognose des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen (LAVA-2)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2014 bis 30.09.2017	Berichtszeitraum: 01.10.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 771.673,00 EUR	Projektleiter: Dr. Meyer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen von LAVA-2 wird ein Modell entwickelt und experimentell abgesichert, mit dem die veränderliche Permeabilität eines Dichtbauwerks aus Salzbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen in Salzformationen infolge der Korrosion durch Salzlösungen zeit- und ortsabhängig beschrieben werden kann. Das Modell soll die diffusionsbestimmte Korrosion durch die geringpermeable störungsfreie Salzbeton-Matrix ebenso beschreiben, wie die Korrosion auf Rissen und Kontaktfugen Dichtbauwerk-Salzgebirge.

Das Vorhaben wird in Kooperation mit dem Vorhaben LASA (Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar) der GRS durchgeführt. Während im Projekt LASA die mechanisch-hydraulischen Eigenschaften im Vordergrund stehen, soll im Projekt LAVA-2 das System bezüglich chemisch-hydraulischer Prozesse untersucht werden. Die Beschreibungen der Einzelprozesse sollen langfristig in ein THMC-Modell zur Prognose des Langzeitverhaltens von Dichtbauwerken aus Salzbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen einfließen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Laborversuche
- AP1.1: Präparation der Salzbetonproben und der Korrosionslösungen
- AP1.2: Ermittlung von Materialkenngrößen des unkorrodierten Salzbetons
- AP1.3: Kaskadenversuche, Versuche zur Ermittlung des Reaktionspfades der Korrosion mit NaCl- und IP21-Lösung
- AP1.4: Vorbereitung der Versuchsreihen
- AP1.5: Durchführung der Versuchsreihen
- AP1.6: Probenahme und Messungen: Matrixproben, Schnittflächen- und Kontaktflächenproben
- AP1.7: Auswertung der Messdaten
- AP2: Modelltheoretische Arbeiten
- AP2.1: Bereitstellung der thermodynamischen Daten
- AP2.2: Test und Anpassung eines reaktiven Stofftransportmodells zur Beschreibung des diffusions- und advektiv bestimmten Lösungsangriffs auf die poröse Matrix von Salzbeton
- AP2.3: Test des reaktiven Stofftransportmodells zur Beschreibung diskreter Risse
- AP3: Simulationsrechnungen
- AP3.1: Geochemische Gleichgewichtsmodellierung der Kaskadenversuche
- AP3.2: Modelltheoretische Betrachtung der Diffusions- sowie Advektionsversuche
- AP3.3: Modelltheoretische Betrachtungen der Schnittflächen- und Kontaktflächenversuche mit diskreten Rissen
- AP4: Dokumentation der Ergebnisse und Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im AP1.1 erfolgte zunächst die Inventarisierung der Salzbetonproben aus dem Asse-Vordamm. Die Proben aus der Bohrkernkiste BKK4 wurden fotodokumentarisch inventarisiert und z. T. bereits präpariert.

Im AP1.3 wurden Teilproben der Salzbetonkerne aufgemahlen und für den Kaskadenversuch zur Verfügung gestellt. Entsprechend wurden die Korrosionslösungen für den Kaskadenversuch hergestellt. Seit November 2014 erfolgt die Durchführung des Kaskadenversuches von Salzbeton im Kontakt mit NaCl-Lösung. Dieser Versuch wird voraussichtlich im Januar 2015 beendet werden.

In AP2.1 erfolgte bereits eine Sichtung von thermodynamischen Daten zur Modellierung des Kaskadenversuches von Salzbeton mit den salinaren Lösungen NaCl (gesättigt) und IP21-Lösung. Im Wesentlichen soll bei der modelltheoretischen Betrachtung der Kaskadenversuche auf die in dem Projekt THEREDA zur Verfügung gestellte Datenbasis zurückgegriffen werden und diese, falls erforderlich, modifiziert werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung der Arbeiten zur Durchführung der Kaskadenversuche. Nach Abschluss der Kaskadenversuche mit den Korrosionslösungen NaCl und IP21 werden die Ergebnisse der Kaskadenversuche modelltheoretisch betrachtet. Des Weiteren werden die Versuchsreihen zur Bestimmung des diffusiven sowie des advektiven Transportes gestartet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11334A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2014 bis 30.11.2017	Berichtszeitraum: 01.09.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 775.880,00 EUR	Projektleiter: Dr. Munoz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Projektes EDUKEM ist die Gewinnung abgesicherter Daten zur Speziation und zu den Löslichkeitsgrenzen von Uran (IV/VI) in verdünnten bis hochsalinaren Lösungen flankiert von methodischen Weiterentwicklungen.

Das Ziel des GRS-Teilprojekts EDUKEM ist die Entwicklung neuartiger elektrochemischer Methoden zur Bestimmung der Speziation von U(IV) und U(VI) in komplexen hochsalinaren Lösungen und zur Gewinnung der entsprechenden thermodynamischen Daten. Dieses Ziel wird in zwei Phasen erreicht. In der ersten Phase werden Nieder- und Hochfrequenzmethoden zur Messung der Ionen-Mobilität in hochsalinaren Milieus entwickelt. Die gewonnenen Daten werden in der zweiten Projektphase für die Auswertung der geplanten potentiometrischen Experimente in Uran-Systemen angewandt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Aufbau des experimentellen Messplatzes
- AP2: Durchführung von experimentellen Messungen der Ionen-Mobilität
- AP3: Auswertung der experimentellen Daten und systematische Darstellung der Ionen-Mobilität durch die MSA-Theorie
- AP4: Durchführung der potentiometrischen Messungen
- AP5: Koordination des Verbundvorhabens
- AP6: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Aufbau des experimentellen Messplatzes
Die elektrochemischen Anlagen zur Messung der Ionen-Mobilität, die aus einer Frequenz-Generator/Analysator für Niederfrequenzmessungen und einem Oszilloskop mit TDR-Modul für Hochfrequenzmessungen bestehen, wurden angeschafft und montiert. Die Handhabung und Bedienung der Anlagen wurden geübt. Die Entwürfe der Messzellen für die Nieder- und Hochfrequenzmessungen wurden bereits erstellt und befinden sich in Konstruktion bei einem extern beauftragten Feinmechaniker.
- AP3: Festlegung des theoretischen Rahmens für die Datenauswertung
Die komplexe physikalische und mathematische Basis als Grundlage für die Auswertung der Messungen wurde durch eine Revision der in der Literatur vorhandenen wissenschaftlichen Arbeiten analysiert. Eine Auswertungsroutine wurde durchdacht und erstellt.
- AP5: Betreuung des Doktoranden
Ein Vertrag mit der TU-Braunschweig, der die Einarbeitung eines Doktoranden in die geplanten Projektaktivitäten ermöglicht, wurde planmäßig abgeschlossen. Der Doktorand wird vom Projektleiter bei seiner Einarbeitung in die neuen Aufgaben betreut.
- AP5: Koordination des Verbundvorhabens
Das Kick-Off Meeting zum Verbundvorhaben wurde organisiert und nachbereitet. Dabei wurden die gemeinsamen Kooperations- und Zusammenarbeiten mit den Verbundpartnern diskutiert und organisiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Testen und Kalibrierung der aufgebauten Nieder- und Hochfrequenzzellen
Die aufgebauten Zellen werden mit Hilfe von Flüssigkeiten mit einer bekannten dielektrischen Charakteristik wie etwa Wasser und Aceton kalibriert.
- AP2/3: Messung und Auswertung der Ionen-Mobilität
Die dielektrische Antwort von binären Elektrolyt-Systemen wie etwa NaCl, KCl und CaCl₂ in Wasser werden systematisch bei 25 °C und in einem breiten Konzentrationspektrum gemessen, d. h. im Nieder- (verdünnte Lösungen) und Hochfrequenzbereich (hochkonzentrierte Lösungen). Mit den gewonnenen Daten wird die Konzentrationsabhängigkeit der Ionenmobilität berechnet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11334B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2014 bis 30.11.2017	Berichtszeitraum: 01.12.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 259.275,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brendler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt EDUKEM (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig und Institut für Nukleare Entsorgung, Karlsruhe Institut für Technologie) setzt neuartige komplementäre Ansätze zur Analyse der Uranspeziation um, welche durch die hohe chemische Komplexität uranhaltiger Lösungen im salinaren Milieu erforderlich sind. Uran bildet im reduzierenden wie auch im oxidierenden Milieu eine Vielzahl von Komplexen, welche oft gleichzeitig und in stark unterschiedlichen Konzentrationen in Lösung vorliegen. Zudem ist für die thermodynamische Beschreibung der Chemie in hochsalinaren Lösungen die Kenntnis ionenspezifischer Wechselwirkungsparameter (Pitzer-Parameter) zwingend erforderlich, um über Aktivitätskoeffizienten eine zuverlässige Einschätzung von Ionenstärkeeffekten auf Löslichkeit und Speziation zu ermöglichen. Die Bestimmung von Pitzer-Parametern mit klassischen Methoden, wie Löslichkeitsexperimenten und spektroskopischen Untersuchungen, soll hier durch alternative elektrochemische Verfahren unterstützt werden. Die Ergebnisse sollen zum Abbau von Unsicherheiten und Konservativitäten bei der Berechnung der Speziation und Löslichkeitsgrenzen von Uran (IV/VI) in hochsalinaren Lösungen führen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Elektrochemische Messungen (GRS)
- AP2: Löslichkeit relevanter U(IV) und U(VI) Phasen (KIT-INE)
- AP3: Spektroskopische Untersuchungen (HZDR-IRE)
- AP3.1: Spektroskopische Charakterisierung von Uran(IV/VI)-Mineral- und -Sekundärphasen
- AP3.2: Spektroskopische Charakterisierung von U(+IV)/U(+VI) in ausgewählten hochsalinaren Lösungen
- AP3.3: Spektroskopische Untersuchungen an Gleichgewichtslösungen
- AP3.4: Ableitung thermodynamischer Parameter
- AP4: Entwicklung eines thermodynamischen Modells für U(VI) (GRS, KIT-INE, HZDR-IRE)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP3.1:

- Recherche zur Auswahl geeigneter Minerale, deren Synthesewege und bereits vorhandener Teildatensätze (spektroskopische Charakterisierung)
- Elektrochemische Darstellung und Charakterisierung von U(IV) in salinaren Lösungen

AP3.2:

- Einarbeitung in die UV/Vis und TRLFS von U(IV)/U(VI)-haltigen Lösungen

4. Geplante Weiterarbeiten

AP3.1:

- Aufwältigung der Ergebnisse der Literaturrecherche und Aufbau einer Spektren-Datenbank

AP3.2:

- Spektroskopie (TRLFS, IR) zu Lösungskomplexen des U(VI) und U(IV) nach Abstimmung mit KIT-INE
- Aufbau des Photoakustik-Messplatzes

AP3.4:

- Vertiefende Einarbeitung in Chemometrie zur Spektren-Interpretation

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11334C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2014 bis 30.11.2017		Berichtszeitraum: 01.12.2014 bis 31.12.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 394.555,00 EUR		Projektleiter: Dr. Altmaier

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel dieses Vorhabens ist die Gewinnung abgesicherter Daten zur Speziation und zu den Löslichkeitsgrenzen von Uran(IV/VI) in verdünnten bis hochsalinaren Lösungen flankiert von methodischen Weiterentwicklungen.

Ziel dieses Projektes ist, zu einem verbesserten Verständnis der Uranchemie in endlagerrelevanten wässrigen Systemen und einer wesentlich verbesserten quantitativen Modellierung der Löslichkeit und Speziation für Quelltermabschätzungen im Rahmen von Langzeitsicherheitsanalysen zu kommen. Die Entwicklung neuartiger komplementärer Messmethoden, die zum Abbau von Ungewissheiten und Konservativitäten bei der Berechnung der Speziation und Löslichkeitsgrenzen von Uran(IV/VI) in hochsalinaren Lösungen führen sollen, ist Teil dieses Ansatzes. Es werden erfolgreich etablierte spektroskopische Analysen und Löslichkeitsmessungen durchgeführt, so dass sowohl ein integrales Bild der untersuchten Systeme abgeleitet werden kann, als auch neu entwickelte spektroskopische und elektrochemische Methoden validiert werden können. Dies gilt vor allem für das für endlagerrelevante Bedingungen besonders wichtige U(IV)-System, für das die Datenlage besonders begrenzt ist, aber auch für das unter nicht-reduzierenden Bedingungen relevante U(VI)-System. Die im Rahmen von EDUKEM gewonnenen thermodynamischen Daten und Modellparameter für U(IV) und U(VI) werden in nationale und internationale Datenbankprojekte (NEA-TDB, THEREDA) implementiert.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Elektrochemische Messungen (GRS)

AP2: *Löslichkeit und Thermodynamik relevanter U(IV) und U(VI) Phasen (INE)*

AP2.1: *Arbeiten zu U(VI)*

AP2.2: *Arbeiten zu U(IV)*

AP3: Spektroskopische Untersuchungen (IRE)

AP4: *Entwicklung eines thermodynamischen Modells für U(VI) – (INE, GRS, IRE)*

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen des einmonatigen Berichtszeitraums wurden die Arbeiten primär auf die Sichtung von Literatur, Vorbereitung des Kick-off Projekttreffens (15. Januar 2015, GRS, Braunschweig) und die Konzeption für die Anstellung und Einarbeitung neuer Mitarbeiter fokussiert.

Es wurden weiterhin für die Arbeitspakete von INE (AP2.1, AP2.2, AP4) grundlegende vorbereitende Arbeiten für das anstehende umfangreiche experimentelle Programm durchgeführt.

Für die im Rahmen von EDUKEM von KIT-INE beantragte Doktorandenstelle konnte Frau Nese Cevirim (Ausbildung an der Ege University, Izmir, Türkei) gewonnen werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Für das erste Halbjahr 2015 sind folgende Aktivitäten geplant:

- Einstellung und Einarbeitung einer/s neuen PostDoc.
- Experimentelle Arbeiten zur Löslichkeit von U(VI) in KCl, Löslichkeit von U(IV) in NaCl und KCl, Redoxchemie von U(IV)/U(VI).
- Ableitung thermodynamischer Modelle und Daten für das zu U(IV) analoge Th(IV) System und der Speziation und Löslichkeit von U(VI) in NaCl Lösungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

2.2 W-Vorhaben

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 W 6263
Vorhabensbezeichnung: Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Kernmaterialüberwachung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 30.09.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2014 bis 31.12.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 772.232,00 EUR	Projektleiter: Dr. Niemeyer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Aufgabe des Vorhabens besteht darin, die Bundesregierung (vertreten durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie, BMWi) in Fragen der internationalen Kernmaterialüberwachung zu beraten und bei der Weiterentwicklung der Kontrollen zu unterstützen. Im Einzelnen zielte das Vorhaben ab auf Lösungsvorschläge zur weiteren Implementierung des Zusatzprotokolls, Einführung der sog. integrierten Sicherungsmaßnahmen (Integrated Safeguards), Weiterentwicklung des sog. Staatskontrollansatzes (State-level Approach), Entwicklung von anlagen- und brennstoffkreislaufspezifischen Kontrollmethoden sowie Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden unter dem Aspekt der Proliferationsresistenz. Die Arbeiten dienten der Bereitstellung von Arbeitspapieren, Techniken und Veröffentlichungen und der Entwicklung von Auswertemethoden mit dem Ziel der Übernahme der Ergebnisse durch BMWi, Euratom-Kontrollbehörde und Internationale Atomenergie-Organisation (IAEO).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Programmpunkte und Arbeitspakete sind

- Weiterentwicklung von Safeguardstechnologien (Digitale Überwachungssysteme und Datenfernübertragung, analytische Messmethoden, Satellitenfernerkundung und Geoinformationstechnologien)
- Neuentwicklung von Safeguardstechnologien (Technologische Zukunftsforschung, Simultane Lokalisierung und Kartenerstellung, geophysikalische Messverfahren, Lasertechniken)
- Safeguards-by-Design
- Safeguards für Nuklearanlagen (Entsorgung abgebrannter Brennelemente, Zentrifugenanreicherungsanlagen)
- Weiterentwicklung des staatspezifischen Kontrollansatzes
- Kooperation mit der DGAP zur technisch-politischen Schnittstelle der internationalen Safeguards
- Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals
- Entwicklung eines Qualitätsmanagements für das EURATOM-Safeguardssystem
- Weiterentwicklung von Safeguards-Überlegungen im Rahmen von „3S“ (Sicherheit, Sicherung, Safeguards)
- Mitarbeit in der European Safeguards R&D Association (ESARDA)
- Weitere Aktivitäten (INMM, SAGSI)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Safeguards-Webportal: Betreuung des Webportals „safeguards.de“.
- Geologische Endlagerung: Grundlagenermittlung zur Fortschreibung der Safeguardskonzepte und Auswirkungen der Rückholungs- und Bergungsoption auf Safeguardsmaßnahmen in verschiedenen Wirtsgesteinen; Leitung des Projekts zur 3-D-Modellierung seismischer Ausbreitung für verschiedene Quellen; Leitung des Projekts zur gerichteten Radartechnologie; Mitarbeit in der Safeguards-Expertengruppe ASTOR der IAEO.
- Einschluss und Überwachung: Anforderungen an Überwachung und Einschluss in der Entsorgung von Brennelementen im Rahmen der integrierten Sicherungsmaßnahmen.
- Datenfernübertragung: Mitarbeit bei der Vereinbarung für die Implementierung der Datenfernübertragung (DFÜ) von Safeguards-Daten aus den Standort-Zwischenlagern.
- ESARDA: Mitarbeit im Steering und Editorial Committee; Leitung der AG „Verification Technologies and Methodologies“; Mitarbeit in den AGn „Containment and Surveillance“, „Destructive Analysis“, „Training and Knowledge Management“ sowie „Implementation of Safeguards“.

- Safeguardsanalytik: Promotionsprojekt gemeinsam mit dem Safeguardslabor der IAEO zur Produktion von Referenzpartikeln; Promotionsprojekt zur Synthese von Kalibrierstandards und Referenzmaterialien; Qualifizierung Jülichs für das Netzwerk der IAEO-Analyselaboratorien (NWAL);
- Satellitenfernerkundung und Geoinformationstechniken: Leitung des Projekts zum Einsatz von Fernerkundung in der IAEO.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von „State-level Concept“ (SLC), „Acquisition Path Analysis“ (APA) und „Safeguards-by-Design“ (SBD).
- AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis: Mitarbeit und Teilnahme an den Sitzungen.
- Standing Advisory Group on Safeguards Implementation (SAGSI): SAGSI-Mitarbeit.
- Zusatzprotokoll und Implementierung von Integrated Safeguards (IS): Unterstützung und Beratung von Betreibern; Unterstützung des BMWi bei Anfragen von IAEO und Euratom; Erstellung der Deklaration für Deutschland nach dem Zusatzprotokoll; Erstellung von Vorlagen zur Einführung von Integrated Safeguards für spezielle Anlagen; Kommentierung von Entwürfen/Vorlagen Dritter.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Auskünfte zu Anfragen des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Leitung eines Projekts zur Verbesserung der Kernmaterialüberwachung der IAEO unter Einbezug neuer analytischer Methoden aus Statistik, Operations Research und Spieltheorie.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Expertensitzung bei der DGAP zu den Themen „Verifikation eines entmilitarisierten Nuklearprogramms in Nordkorea“, „Perspektiven auf die NPT Überprüfungskonferenz 2015“ und „Der Atomkonflikt mit Iran (16.10.14)“.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Safeguards-Webportal: Betreuung des Webportals „safeguards.de“.
- Geologische Endlagerung: Fortsetzung der Grundlagenermittlung zur Fortschreibung der Safeguardskonzepte sowie der Arbeiten zur 3-D-Modellierung seismischer Ausbreitung für verschiedene Quellen sowie zur gerichteten Radartechnologie.
- Einschluss und Überwachung: Anforderungen in der Entsorgung von Brennelementen.
- Datenfernübertragung: Unterstützung bei der Implementierung der DFÜ von Safeguards-Daten aus den Standort-Zwischenlagern.
- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA-Arbeitsgruppen und -Gremien.
- Novel Technologies: Erweiterte Machbarkeitsstudie zu Navigations- und Positionierungstechniken.
- Safeguardsanalytik: Fortsetzung der Promotionsprojekte zur Produktion von Referenzpartikeln sowie zur Synthese von Kalibrierstandards und Referenzmaterialien; Fortsetzung der Qualifizierung Jülichs für IAEO-NWAL.
- Satellitenfernerkundung: Weiterführung der Studie zum Einsatz von Fernerkundung.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von SLC, APA und SBD.
- Mitarbeit in den nationalen Gremien AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis.
- SAGSI: SAGSI-Mitarbeit.
- Unterstützung des BMWi bei Umsetzung des Zusatzprotokolls und Einführung und Bewertung von IS.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Beratung des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Wissenschaftliche Beiträge, Teilnahme an Sitzungen bei der IAEO.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: DGAP-Expertensitzungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Veröffentlichungen im Tagungsband des IAEA Safeguards Symposium, Wien, 20.-24.10.2014:

d'Angelo et al.: High Resolution 3D Earth Observation Data Analysis for Safeguards Activities

Dürr et al.: Activities at Forschungszentrum Jülich in Safeguards Analytical Techniques and Measurements

Listner et al.: Quantifying Detection Probabilities for Proliferation Activities in Undeclared Facilities

Niemeyer, I. et al.: Safeguarding Geological Repositories – R&D Contributions from the German Support Programme

3 Verzeichnis der Forschungsstellen

Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		
02 E 10910	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	46
02 E 11061C	Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT)	76
DBE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		
02 E 10729	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	18
02 E 10730	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	20
02 E 10760	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsausgabe zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen - Kurztitel: URSEL	26
02 E 10900	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	44
02 E 11061B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein	74
02 E 11082	Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) Phase II - Generierung von Rissystemen einer Auflockerungszone im Korngrößenmaßstab und Überführung der Ergebnisse auf die Makroebene zur Simulation eines Injektionsvorganges	88
02 E 11152	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	100
02 E 11182B	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS	104
02 E 11193B	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	108
02 E 11233	Status Quo der Lagerung C-14-haltiger Abfälle aus deutschen Hochtemperatur- und Forschungsreaktoren und Strategie (Lösungsansatz) zu deren künftigen Endlagerung (CarbonForeSt)	118
02 E 11263	Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa)	124
02 E 11294	Entwicklung technischer Konzepte zur Rückholung von Endlagerbehältern mit wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen aus Endlagern in Salz- und Tongesteinsformationen (ERNESTA)	130124

Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz
--

- | | | |
|------------|---|----|
| 02 E 10810 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel) | 28 |
|------------|---|----|

Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich

- | | | |
|-----------|--|-----|
| 02 W 6263 | Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden | 146 |
|-----------|--|-----|

Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena

- | | | |
|-------------|--|----|
| 02 E 11062B | Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR) | 80 |
|-------------|--|----|

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mit beschränkter Haftung, Schwertnergasse 1, 50667 Köln
--

- | | | |
|-------------|---|----|
| 02 E 10367 | Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen | 10 |
| 02 E 10377 | Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen | 12 |
| 02 E 10689 | Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS | 14 |
| 02 E 10719 | Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA) | 16 |
| 02 E 10740 | Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager | 22 |
| 02 E 10750 | Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsausage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen - Kurztitel: URSEL | 24 |
| 02 E 10890 | Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS | 42 |
| 02 E 10941 | Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL | 48 |
| 02 E 10951 | Diffusion in kompaktiertem Salzgrus – DIKOSA | 50 |
| 02 E 11061A | Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein | 72 |
| 02 E 11062A | Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR) | 78 |
| 02 E 11072A | Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- K_d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS | 84 |
| 02 E 11102 | Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern | 92 |
| 02 E 11122 | Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA | 94 |
| 02 E 11132 | Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA | 96 |

- 02 E 11142 Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS 98
- 02 E 11182A Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS 102
- 02 E 11203A Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e 110
- 02 E 11213 Qualifizierung der Rechenprogramme d^3f und r^3t , Kurztitel Quader 114
- 02 E 11243 Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborative und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Re-kompaktionsverhalten der EDZ(LASA-EDZ) 120
- 02 E 11273 Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Vorprojekt (UMB-V) 126
- 02 E 11284 Bentonitaufsättigung in geotechnischen Barrieren im Endlager-Nahfeld (BIGBEN) 128
- 02 E 11304 Tonforschung im Untertagelabor Mont-Terri 132
- 02 E 11314 Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen (KORPHA) 134
- 02 E 11324 Entwicklung eines chemisch-hydraulischen Modells für die Prognose des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen (LAVA-2) 136
- 02 E 11334A Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt A 138

Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 400 (B6), 01328 Dresden

- 02 E 10971 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf 54
- 02 E 11072B Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- K_d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR 86
- 02 E 11334B Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt B 140

IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig

- 02 E 10830 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG) 32

Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz

- 02 E 10981 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz 56

Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main

- 02 E 11062C Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)  82

Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover

- 02 E 10850 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)  36

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg

- 02 E 11031 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg  66

Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen

- 02 E 10840 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)  34
- 02 E 10961 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie  52
- 02 E 11203B Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e  112
- 02 E 11334C Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt C  142

Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg

- 02 E 10880 Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Baustoffs  40
- 02 E 11092 Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1  90
- 02 E 11193A Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen  106

Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig

- 02 E 10860 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)  38

Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2A, 38678 Clausthal-Zellerfeld

- | | | |
|------------|--|-------|
| 02 E 10820 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC) | 📖 30 |
| 02 E 11041 | Kopplung der Softwarecodes FLAC3D und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Untersuchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten in Tongestein unter Endlagerbedingungen | 📖 68 |
| 02 E 11051 | Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern | 📖 70 |
| 02 E 11223 | Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Vorprojekt zur Kalkulation und Qualifizierung der Forschungsarbeiten | 📖 116 |
| 02 E 11253 | Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung – Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden) | 📖 122 |

Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden
--

- | | | |
|------------|---|------|
| 02 E 11021 | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden | 📖 64 |
|------------|---|------|

Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München
--

- | | | |
|------------|---|------|
| 02 E 11001 | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München | 📖 60 |
|------------|---|------|

Universität des Saarlandes, Campus Saarbrücken, 66123 Saarbrücken
--

- | | | |
|------------|---|------|
| 02 E 10991 | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes | 📖 58 |
|------------|---|------|

Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam

- | | | |
|------------|--|------|
| 02 E 11011 | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam | 📖 62 |
|------------|--|------|