

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

PTE Nr. 49

BMWf geförderte FuE-Vorhaben zur
„Entsorgung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 1. Januar - 30. Juni 2015

Projektträger Karlsruhe
Wassertechnologie und Entsorgung
(PTKA-WTE)

September 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:

- Entsorgung 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

Im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) arbeitet das KIT seit 1991 als Projektträger auf dem Gebiet „Entsorgung“.

Im Rahmen dieses Auftrages betreut der Projektträger Karlsruhe fachlich und administrativ die vom BMWi im Rahmen des jeweilig gültigen Förderkonzepts geförderten FuE-Vorhaben. Seit Februar 2015 ist das Förderkonzept „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle“ (2015-2018) Grundlage der Projektförderung.

Die FuE-Inhalte sind in folgende *sechs FuE-Bereiche* aufgeteilt innerhalb derer Projekte gefördert werden können:

- Bereich 1: Auswirkung verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle und Behälter
(Federführend PT GRS)
- Bereich 2: Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl
- Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik
- Bereich 4: Sicherheitsnachweis
- Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen
- Bereich 6: Kernmaterialüberwachung (Safeguards)

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.

Der Bericht ist wie folgt gegliedert:

Teil 1 listet die FuE-Vorhaben auf, die dem jeweiligen FuE-Bereich zugeordnet sind.

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

- E ⇒ „Entsorgung radioaktiver Abfälle“ und
- W ⇒ „Kernmaterialüberwachung“.

Teil 3 listet die FuE-Vorhaben, zugeordnet nach der jeweiligen Forschungsstelle, auf.

Inhaltsverzeichnis

1	Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche	1
1.1	<i>Auswirkung verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle und Behälter</i>	<i>1</i>
1.2	<i>Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl</i>	<i>3</i>
1.3	<i>Endlagerkonzepte und Endlagertechnik.....</i>	<i>5</i>
1.4	<i>Sicherheitsnachweis</i>	<i>7</i>
1.5	<i>Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen.....</i>	<i>13</i>
1.6	<i>Kernmaterialüberwachung.....</i>	<i>15</i>
2	Formalisierte Zwischenberichte	17
2.1	E-VORHABEN	17
2.2	W-VORHABEN.....	145
3	Verzeichnis der Forschungsstellen	149

1 Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche

1.1 Auswirkung verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle und Behälter

Bisher keine Vorhaben in diesem FuE-Bereich

1.2 Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl

Bisher keine Vorhaben in diesem FuE-Bereich

1.3 Endlagerkonzepte und Endlagertechnik

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	📖 82
02 E 11092	Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 84
02 E 11132	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) GmbH, Köln	📖 90
02 E 11152	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 94
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	📖 100
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	📖 102
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) GmbH, Köln	📖 110
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	📖 112
02 E 11263	Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 114
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	📖 120

1.4 Sicherheitsnachweis

02 E 10367	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 18
02 E 10377	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 20
02 E 10719	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 22
02 E 10729	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 24
02 E 10740	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 26
02 E 10750	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 28
02 E 10760	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen – Kurztitel: URSEL	DBE Technology GmbH, Peine	📖 30
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	📖 32
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	📖 34
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	📖 36
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-	📖 38

		Leopoldshafen	
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	📖 40
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	📖 42
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) gGmbH, Köln	📖 44
02 E 10951	Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 46
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	📖 48
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	📖 50
02 E 10981	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz	Johannes Gutenberg-Universität Mainz	📖 52
02 E 10991	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes	Universität des Saarlandes, Saarbrücken	📖 54
02 E 11001	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München	TU München	📖 56
02 E 11011	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam	Universität Potsdam	📖 58
02 E 11021	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden	TU Dresden	📖 60
02 E 11031	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg	Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg	📖 62

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	📖 64
02 E11061A	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 66
02 E11061B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 68
02 E11061C	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	📖 70
02 E11062A	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 72
02 E11062B	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	Friedrich-Schiller-Universität Jena	📖 74
02 E11062C	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	Johann Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt am Main	📖 76
02 E11072A	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- K_d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 78
02 E11072B	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- K_d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 80
02 E11102	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 86
02 E11122	Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 88
02 E 11142	Performance Assessment of Sealing Systems - Kurztitel: PASS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 92

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) gGmbH, Köln	📖 96
02 E11182B	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SAnToS	DBE Technology GmbH, Peine	📖 98
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) gGmbH, Köln	📖 104
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	📖 106
02 E11213	Qualifizierung der Rechenprogramme d^3f und r^3t , Kurztitel Quader	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 108
02 E 11273	Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Vorprojekt (UMB-V)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 116
02 E 11284	Bentonitaufsättigung in geotechnischen Barrieren im Endlager-Nahfeld (BIGBEN)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 118
02 E 11304	Tonforschung im Untertagelabor Mont-Terri	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 122
02 E 11314	Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen (KORPHA)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 124
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) gGmbH, Köln	📖 126
02 E 11334A	Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 128
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	📖 130

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	 132
02 E 11344A	Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 134
02 E 11344B	Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.	 136
02 E 11344C	Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt C	Ernst-Moritz-Arndt- Universität Greifswald	 138
02 E 11365	Lösungsverhalten von Spalt- und Aktivierungsprodukten im Nahfeld eines Endlagers (LÖVE)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 142

1.5 Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen

- 02 E 11355** Eine experimentelle Analyse der Verhandlungen um ein Endlager für radioaktive Abfälle (Expander) **Karlsruher Institut für Technologie (KIT)**  140

1.6 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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3; Wirtsgestein: unabhängig	
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2007 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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

AP1:

Zum Erwerb des aktuellen Wissens auf dem Gebiet von Strömungs- und Transportprozessen in porösen Medien wurde an der internationalen Konferenz "INTERPORE 2015" vom 18. zum 21.5. in Padova (Italien) 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).

Im Rahmen des Wissens- und Erfahrungsaustauschs auf dem GRS-internen Workshop "Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen" am 24.03. wurde das Framework RepoSTAR zur Ausführung von probabilistischen Rechenläufen vorgestellt.

AP2:

Die Erstellung des Konzepts für das RepoTREND-Nahfeldmodul NaTREND wurde fortgesetzt. In der aktuellen Arbeitsphase erfolgten die Ermittlung und Analyse von Anforderungen sowie die Evaluierung von vorhandenen und die Erstellung von eigenen Konzepten und Modellen. In internen Diskussionsrunden wurden fachliche Aspekte vertieft und vorgeschlagene Modelle auf ihre Tauglichkeit untersucht. Im berichteten Zeitraum lagen die Schwerpunkte insbesondere auf folgenden Themen:

- Anforderungserfassung und Konzeptentwicklung für Gebirgskonvergenz in einem Endlager im Salzgestein sowie für Korrosion von Metallen in einem Endlager,
- Konzept zur Gitterbildung für ein diskretes System,
- Konzept zur flexiblen Anbindung von endlagerrelevanten Effekten und Prozessen zu den Basisgleichungen für die Strömungs- und Transportprozesse auf der mathematischen und programmtechnischen Ebene.

Auf Basis der im Rahmen des Projekts MOSEL (FZ 02E10941) bereitgestellten neuen Softwarebibliothek Simlab4 wird der Programmrahmen RepoSTAR für statistische Rechenläufe überarbeitet und um ein Programm zur Auswertung probabilistischer Rechnungen im Hinblick auf Ungewissheits- und Sensitivitätsanalyse erweitert. Dazu wurde im ersten Halbjahr 2015 zunächst das Modul zur Stichprobenziehung, das bislang als unabhängiges Einzelprogramm für das Betriebssystem Windows vorlag, auf Linux portiert, erweitert und in die Modulkette von RepoTREND integriert. Mit der Konzeptionierung des Auswerteprogramms wurde begonnen.

Zur Optimierung der Arbeit mit der grafischen Benutzeroberfläche XENIA ist die Umsetzung einiger zusätzlicher Funktionalitäten wünschenswert. Es wurden aktuelle Anforderungen zusammengefasst und an den Unterauftraggeber Fa. BREDEX (Entwickler von XENIA) zur Abschätzung des Umsetzungsaufwandes gereicht. Die wichtigsten Anforderungen dabei sind: Versionierung von Rechenläufen, Verbesserung der Funktionalitäten für statistische Analysen, Verbesserung der Datensicherung beim Umstieg auf neue Rechenmodulversionen.

AP5:

Ein Artikel zu dem in COFRAME umgesetzten Modell des kolloidbeeinflussten Nuklidtransports in geklüftet-porösen Medien wurde bei der Fachzeitschrift "Transport in Porous Media (TIPM)" im März in der ersten Version und im Juni in einer entsprechend den Anmerkungen von Reviewern überarbeiteten Version eingereicht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterhin sollen für das Nahfeldmodul NaTREND relevante vorhandene Modelle und Konzepte identifiziert und evaluiert sowie eigene Konzepte erstellt 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.: Effects of kinetic interactions in colloid-facilitated transport of contaminants in fractured-porous media, 18. – 21. Mai, 2015, Padova (Italien)

(https://www.interpore.org/images/conferences/15Padova/Files/Abstracts/Abstracts_Oral/871.pdf)

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10377
Vorhabensbezeichnung: Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1; Wirtsgestein: Ton	
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 31.12.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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 zur Schädigung bzw. Permeabilitätsentwicklung von Tonstein sind erfolgreich durchgeführt und ausgewertet worden. Daraus wurden die Dilatanzgrenze und Bruchfestigkeiten ermittelt. Die Permeabilitätsänderungen wurden im Zusammenhang mit den mechanischen Belastungen ermittelt. Ein Modellansatz zur Beschreibung der Permeabilitätsänderungen ist formuliert worden.
- Uniaxiale und triaxiale Kriechversuche zur Ermittlung des Kriechverhaltens von Tonsteinen mit geringerem Tonmineralanteil und höheren Anteilen von Sand- und Karbonatkomponenten wurden gestartet. Drei Proben aus der Opalinustonformation im Mont-Terri-URL und eine Probe aus der COX-Tonformation im Bure-URL wurden bisher untersucht.
- Versuche zur Bestimmung des Wasseraufnahmevermögens der sandigen und karbonat-reichen Tonsteine laufen.
- Verheilungsversuche an sandigen und karbonatreichen Tonsteinen sind an zwei OPA-Tonproben und zwei COX-Tonproben gestartet worden. Die Proben wurden durch Spaltzugbelastung vorgeschädigt. Das Verheilungsvermögen der Tonsteine wird während der Durchströmung der Proben mit Tonformationswasser bei unterschiedlichen Spannungen ermittelt. Die dabei sich ändernde Permeabilität zeigt den Grad der Verheilung des Gesteins an.
- Untersuchungen zur Eignung des Ausbruchmaterials aus der Streckenauffahrung als Versatz- und Verschlussmaterial laufen. Deren Ziel 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 Gasdurchbruchdruck 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.
- Teilnahme an (1) ANDRA-Fachgespräch im Feb. zur Diskussion über das neues THMG-Forschungsprogramm; (2) 6th International Clay Conference in März; und CODE-BRIGHT-Workshop bzw. Konsortium-Treffen im Mai.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Verheilungsversuche an sandigen und karbonatigen Tongestein
- Weiterführung der Versuche am Versatz- und Verschlussmaterial
- Implementierung / Validierung des Kriech- und Permeabilitätsmodells (UPC / CIMNE)
- Bestimmung der Stoffparameter der Versatzmischungen
- Modellierung der durchgeführten Laborversuche an Versatzmaterialien und Tonstein

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang, C.L.: The Stress-Strain-Permeability Behaviour of clay Rock, 6th International Meeting on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Brussels, March 23-26 2015.

Zhang, C.L.: Self-Sealing of Fractures in Clay Rock, 6th International Meeting on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Brussels, March 23-26 2015.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2; Wirtsgestein: Salz	
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2009 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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: Die Struktur des vorhandenen Berichts wurde überarbeitet und der Bericht mit neuen Inhalten (Bewertung der vorhandenen Ergebnisse aus Sicht der Führung eines Langzeitsicherheitsnachweises) erweitert. Der Test der Modifikationen am Programmcode d³f, die für die hydrogeologischen Rechnungen zum Deckgebirge über dem Salzstock Gorleben notwendig waren, wurde erfolgreich abgeschlossen.
- AP4: Die Arbeiten sind abgeschlossen.
- AP5: Die Überprüfung des für die Konsequenzenanalyse zur Verfügung stehenden probabilistischen Instrumentariums wurde fortgeführt. Die erzielten Ergebnisse wurden in einem vorläufigen Bericht dokumentiert.
- AP6: Veröffentlichung des Berichtes zu AP6 erfolgte im ersten Halbjahr 2015 (siehe 5., Bericht wurde gemäß Zitat im Dezember 2014 inhaltlich abgeschlossen, die Drucklegung erfolgte erst 2015).
- AP7: Die Arbeiten sind abgeschlossen.
- AP9: Es wurden keine Arbeiten durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Der Bericht zu den geochemischen Rechnungen und den hydrogeologischen Rechnungen wird im Laufe des Jahres 2015 veröffentlicht.
- AP5: Die Überprüfung des für die Konsequenzenanalyse zur Verfügung stehenden probabilistischen Instrumentariums wird fortgeführt. 2015 stehen insbesondere der Vergleich probabilistischer Ergebnisse mit den regulatorischen Vorgaben und die Erstellung des Abschlussberichtes im Vordergrund.
- 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

Brasser, T., Fahrenholz, C., Kull, H., Meleshyn, A., Mönig, H., Noseck, U., Schönwiese, D., Wolf, J. (2014): Natürliche Analoga im Wirtsgestein Salz. GRS-365, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2; Wirtsgestein: Salz	
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2009 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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:
Ein ausführlicher Zwischenbericht zu allen bisherigen Arbeiten wurde in englischer Sprache erstellt und Anfang 2014 verteilt.
- AP8: Entwicklung einer Methodik zur anforderungsorientierten Konzeption eines HAW-Endlagers und zur Konzeptoptimierung:
Die Arbeiten zur Entwicklung einer Methodik zur anforderungsorientierten Konzeption eines HAW-Endlagers wurden fortgeführt. Dabei wurde deutlich, dass aus dem jeweils geforderten Sicherheitskonzept für ein HAW-Endlager konkrete Anforderungen an den Standort, das Endlagerkonzept und die Endlagerauslegung abgeleitet werden können. Dennoch zeigte sich bei den weiteren Überprüfungen, dass HAW-Endlager Unikate sind, bei deren Konzeptfindung Freiheitsgrade bestehen (z. B. Auswahl eines Endlagerbehälters hinsichtlich Material und Dimension, die dafür angemessene Art und Weise der Transport- und Einlagerungstechnik). Die Summe an vorhandenen Anforderungen ergibt nicht zwangsläufig einen umfassenden konkreten Rahmen für eine einzige Endlagerkonzeption, sondern es gibt immer in gleicher Weise geeignete Alternativen.
- 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". Der Entwurf der neuen NEA-IFEP-Liste wurde, unter Berücksichtigung der Erfahrungen in den deutschen Projekten, kommentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP8: Es sollen Beispiele für die anforderungsgerechte Endlagerkonzeption und –optimierung dargestellt werden unter Berücksichtigung von Vorgehensweisen in anderen Industriebereichen.
- AP9: Diskussion der neuen IFEP-Liste unter Berücksichtigung der Erfahrungen in den deutschen Projekten. Ermittlung der Rahmenbedingungen und des Procedere 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: 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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1; Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2010 bis 31.10.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 Berichterstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Nachdem der rechnerische Wert für die Porosität der beiden feuchten Proben unter null gegangen ist, wurde das Versuchsende eingeleitet, indem die Belastung der Proben schrittweise zurückgenommen wurde. Bis zu einer Entscheidung über die Art der Nachuntersuchungen bleiben die Proben jedoch unter einer Restlast von einem MPa in ihren Zellen.

Der triaxiale Kompaktionsversuch im Autoklaven mit vier unterschiedlich feuchten Proben (0 %, 0,3 %, 0,6 % und 2,0 %) wurde nach dem Jahreswechsel beendet.

Da ein Zweiphasenflusstest ca. 3 Monate in Anspruch nimmt und nach der Aufsättigung durchgängig betreut werden muss, ließen sich die Versuche im Berichtszeitraum aufgrund personeller Engpässe nicht weiterführen.

Die bislang erzielten wesentlichen Projektergebnisse wurden auf der internationalen Konferenz Mechanical Behavior of Salt VIII in Rapid City vorgestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Nachuntersuchung der Proben aus dem Langzeitkompaktionsversuch
- Auswertung des Kompaktionsversuchs im Autoklaven
- Wiederaufnahme der Zweiphasenflussversuche im Herbst
- THM-gekoppelte Modellierung
- Beginn der Erstellung des Abschlussberichts

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1; Wirtsgestein: Salz	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.09.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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

Die Bestimmung der hydraulischen Parameter der von den russischen Partnern übergebenen Gesteinsproben aus der Kernbohrung R12 wurde fortgeführt. Die Messung der Permeabilität für eine synthetische Lösung wurde zuerst an den Proben durchgeführt, für die zuvor die höchsten Gaspermeabilitäten bestimmt wurden. Je niedriger die Gaspermeabilität einer Probe, desto niedriger ist auch die erwartete Lösungspermeabilität, wodurch sich der Zeitaufwand für die Bestimmung deutlich erhöht hat.

Die Arbeiten zu AP5 „Präzisierung des sicherheitsanalytischen Modells und Bewertung möglicher radiologischer Konsequenzen“ wurden abgeschlossen. Sie beinhalteten Strömungs- und Transportrechnungen für das Fernfeld mit d^3f und r^3t , Transportrechnungen mit RepoTREND und Sensitivitätsanalysen für das Nah- und Fernfeld. Hierdurch konnten Aussagen über die Robustheit der Sicherheitsfunktionen gewonnen und damit Konsequenzen für die Langzeitsicherheit abgeschätzt werden. Ein Zwischenbericht wurde bereits Ende 2014 vorgelegt.

Ein Projekttreffen mit russischen Vertretern des Instituts für Geoökologie der Universität St. Petersburg wurde vom 20. bis 24. April 2015 in Peine / Braunschweig / Hannover unter Beteiligung von DBE Tec, BGR und GRS abgehalten. Dabei wurden unter anderem die bisherigen Arbeiten aller beteiligten Institutionen für den Standort Jennissejskij vorgestellt und Möglichkeiten zur zukünftigen Zusammenarbeit diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Bestimmung der Permeabilität für eine synthetische Lösung wird für die noch nicht untersuchten Kernproben abgeschlossen, sofern dies aufgrund der sehr niedrigen Permeabilitäten möglich ist. Die Ergebnisse der Laboruntersuchungen werden in den gemeinsamen Abschlussbericht aufgenommen.

Ein Besuch der russischen Projektpartner, vertreten durch VNIPI Promtehnologii, bei den beteiligten deutschen Organisationen, vertreten durch DBETec, BGR und GRS, ist im Herbst 2015 geplant. Auf diesem Treffen sollen letzte Ergebnisse aus dem Projekt URSEL diskutiert, der Abschlussbericht abgestimmt und das weitere Vorgehen beschlossen werden.

Ein Gegenbesuch der deutschen Partner in Krasnojarsk und die Teilnahme an einem Internationalen Workshop unter Beteiligung russischer, koreanischer, schwedischer, französischer und US-amerikanischer Fachkollegen ist ebenfalls im Herbst 2015 geplant. Ergebnisse des Workshops sollen im Abschlussbericht berücksichtigt werden.

Der Abschlussbericht wird auf der Grundlage des vorliegenden Zwischenberichts erstellt und unter anderem um die Ergebnisse der Laboruntersuchungen an den Proben aus der Kernbohrung R12 und die Ergebnisse der oben genannten Treffen mit den internationalen Projektpartnern ergänzt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2; Wirtsgestein: Kristallin		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.09.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 22.04.2015 in Peine. Auf diesem Treffen wurden sowohl aktuelle Arbeiten als auch offene Fragen für eine zukünftige weitere Zusammenarbeit diskutiert.

Basierend auf der lithologischen Schichtabfolge und den damit einhergehenden Kluftsystemen sowie auf Basis der aktuellen Grubengebäudeplanung seitens VNIPI-PT wurde der erste Entwurf für ein Verfüll- und Verschlusskonzept fertig gestellt. Sowohl die Einlagerungsbohrlöcher, die Einlagerungsstrecken, die Zugangsstrecken sowie insbesondere die Schächte sollen mit Abdichtmodulen versehen werden, die sich möglichst gegenseitig in ihrer Wirkung ergänzen.

Als Abdichtmaterialien wurden neben Bentonit auch Bitumen, Asphalt und Bitumen-Schottergemische vorgesehen. Für die Konstruktion von Widerlagern wurde Beton vorgesehen, der auch in Mischformen hergestellt werden kann, die es auch erlauben, ihn für Abdichtzwecke einsetzen zu können.

Aus diesen Materialien wurden Dichtmodule konzipiert, mit denen an den oben genannten Lokationen Abdichtbauwerke errichtet werden können. Dabei können die entwickelten Module auch miteinander kombiniert eingesetzt werden. Ein spezielles Dichtmodul wurde für den Einsatz im Bereich wasserführender Kluftzonen entwickelt. Insgesamt erfüllt das Verschlusskonzept die Anforderung eines redundanten und diversitären Systems.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschließende Arbeiten zur Entwicklung eines Verfüll- und Verschlusskonzeptes auf Basis der aktuellen Grubengebäudeplanung.

Durchführung eines abschließenden Arbeitstreffen oder Workshops in Russland zur Vorstellung und Diskussion der Arbeitsergebnisse.

Termingerechte Erstellung eines gemeinsamen Abschlussberichtes zu diesem Verbundvorhaben.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M., Flügge, J., Hammer, J., Krone, J., Kühnlenz, 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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1; Wirtsgestein Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 30.09.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 Stoffgesetzmöglichkeiten 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 Nachrechnungen zahlreicher Laborversuche mit Steinsalz vom Typ clean salt und argillaceous salt aus der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) in New Mexico (USA) durch und bestimmte für sein CDM-Stoffgesetz die jeweiligen salztypspezifischen Parameterkennwertsätze. Mit diesen berechnete er anschließend die Spannungs-, Verformungs- und Schädigungsentwicklung bei Gebirgstemperatur in dem die Kammer Room D in der WIPP umgebenden Steinsalz. Danach begann er die Simulationen zu Room B der WIPP, in dem das Steinsalz unter der Kammer mit Erhitzern in 1000 Tagen bis auf 125 °C aufgeheizt worden war. Der Vergleich der Ergebnisse dient zur Untersuchung der Modellierung des Temperatureinflusses auf das In-situ-Verformungsverhalten von Steinsalz in der WIPP.

Arbeiten und Ergebnisse aus dem Verbundprojekt präsentierte der Zuwendungsempfänger auf der Saltmech-8-Konferenz am 26.-28.05.2015 in Rapid City, South Dakota, USA. Ferner führte er gemeinsam mit den Partnern die Projektworkshops Nr. 16 am 10.-11.02. in Leipzig, Nr. 17 am 24.-25.03. in Braunschweig und Nr. 18 am 30.05.2015 in Rapid City, South Dakota, USA durch.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird mit seinem Stoffgesetz CDM die Benchmark-Berechnungen zum Temperatureinfluss auf das Verformungsverhalten des Steinsalzes in der Umgebung des Room B der WIPP fortführen und schließlich mit der Erstellung des Abschlussberichtes zu seinem Teilprojekt beginnen.

Die Arbeiten des Verbundes wird der Zuwendungsempfänger auf dem 6th US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation am 07.-09.09.2015 in Dresden präsentieren. Außerdem wird er mit den Partnern den Projektworkshop Nr. 19 am 23.-24.07.2015 in Braunschweig und Nr. 20 am 05.-06.09.2015 in Leipzig sowie weitere Treffen durchführen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Literatur zum CDM-Stoffgesetz und zum aktuellen Verbundprojekt:

A. Hampel (2015): Description of damage reduction and healing with the CDM constitutive model for the thermo-mechanical behavior of rock salt. *) S. 301-310.

A. Hampel, R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, S. Yildirim, R. Rokahr, A. Gärken, C. Missal, J. Stahlmann, K. Herchen & K.-H. Lux (2015): 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. *) S. 349-359.

K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, D. Naumann, T. Popp, A. Hampel, K.-H. Lux, K. Herchen, U. Düsterloh, J.G. Argüello & F. Hansen (2015): Joint Project III on the comparison of constitutive models for the thermo-mechanical behavior of rock salt – II. Extensive laboratory test program with clean salt from WIPP. *) S. 3-12.

U. Düsterloh, K. Herchen, K.-H. Lux, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Hampel, J.G. Argüello & F. Hansen (2015): Joint Project III on the comparison of constitutive models for the thermo-mechanical behavior of rock salt – III. Extensive laboratory test program with argillaceous salt from WIPP and comparison of test results. *) S. 13-21.

*) In: L. Roberts, K. Mellegard & F. Hansen (Hrsg.): Proc. of the Conference on Mechanical Behavior of Salt, Saltmech VIII, South Dakota School of Mines & Technology, Rapid City, SD, USA, 26.-28.05.2015, Taylor & Francis Group, London, ISBN 978-1-138-02840-1.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1; Wirtsgestein Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 10./11. Februar 2015 in Leipzig, am 24./25. März 2015 in Braunschweig sowie am 30. Mai 2015 in Rapid City / USA jeweils einen Projekt-Workshop durch. Auf dem Projekt-Workshop in Leipzig wurden von den Projektpartnern Re-Simulationen von Laborversuchen sowie modifizierte numerische Simulationsergebnisse zur Situation „Room D“ in der WIPP-Site verglichen und diskutiert. Der Zuwendungsempfänger präsentierte die Ergebnisse seiner vorgenommenen Stoffmodellmodifikation, die sich durch eine verbesserte Beschreibung der Dilatanz- und Schädigungsentwicklung auszeichnet. Aufgrund dieser Modifikationsarbeiten mussten die Stoffmodellparameter neu ermittelt werden, so dass der Zuwendungsempfänger diese sowie die Re-Simulationen der Versuche an WIPP-Salz vorstellte. Die Berechnungen der Untertagesituation „Room D“ in der WIPP-Site wurden mit dem modifizierten Stoffmodell neu durchgeführt und die Daten zum Ergebnisvergleich im Vorfeld des Workshops in Braunschweig zur Verfügung gestellt. Neben diesen Arbeiten stellte der Zuwendungsempfänger eine Präsentation zum Themenfeld „Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung“ vor, welche zwischen den Partnern inhaltlich diskutiert wurde. Diese Präsentation wurde anschließend am 17. April 2015 bei einem Treffen der Projektpartner mit dem Projektträger und dem Projektförderer für ein mögliches Folgevorhaben dargestellt. Auf dem Workshop in Rapid City wurde diese Präsentation auch den amerikanischen Kollegen vorgestellt sowie ein erneuter Ergebnisvergleich der Berechnungen zu „Room D“. Darüber hinaus führte der Zuwendungsempfänger erste Berechnungen der Untertagesituation „Room B“ durch. Hierbei handelt es sich um die Re-Simulation eines Erhitzerexperiments in der WIPP-Site. Am 26. Mai 2015 präsentierte der Zuwendungsempfänger die Laborergebnisse an tonhaltigem Steinsalz der Lokation WIPP-Site auf der internationalen Konferenz „The Mechanical Behavior of Salt VIII“ in Rapid City. Außerdem wurden die restlichen Laborergebnisse des im 2. Halbjahr 2014 beendeten Laborprogramms auf dem Workshop in Leipzig allen Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Düsterloh, U., Herchen, K., Lux, K.-H., Salzer, K., Günther, R.-M., Minkley, W., Hampel, A., Argüello, J.G. & Hansen, F.D., 2015: Joint Project III on the Comparison of Constitutive Models for the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt - III. Extensive laboratory test program with argillaceous salt from WIPP and comparison of test results.

Hampel, A., et al., 2015: 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. of the 8th Conference, 26-28 May 2015, South Dakota School of Mines & Technology, Rapid City, SD, USA, p. 349-359. London: Taylor & Francis Group (Balkema).

Salzer, K., et al., 2015: Joint Project III on the Comparison of Constitutive Models for the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt - II. Extensive laboratory test program with clean salt from WIPP.

Alle Veröffentlichungen in: L. Roberts, K. Mellegard & F. Hansen (eds.), The Mechanical Behavior of Salt VIII, Proceedings of the 8th Conference, 26-28 May 2015, South Dakota School of Mines & Technology, Rapid City, SD, USA, p. 3-12. London: Taylor & Francis Group (Balkema).

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1; Wirtsgestein Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 Stoffgesetzmöglichkeiten 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 10./11. Februar in Leipzig, am 24./25. März in Braunschweig und am 30. Mai in Rapid City, 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 16., 17. und den 18. Projekt-Workshop gemeinsam mit den Partnern am 10. und 11. Februar in Leipzig, am 24. und 25. März in Leipzig sowie am 30. Mai in Rapid City vorbereitet und durchgeführt. Auf den Workshops wurden die Ergebnisse der bisherigen Arbeiten sowie der Zusammenarbeit mit Sandia National Laboratories vorgestellt und diskutiert.

Dabei schafft das 2014 durch IfG und TUC abgeschlossene Laborversuchsprogramm die Voraussetzungen für die Durchführung der in der Verlängerungsphase geplanten Benchmark-Berechnungen für Room B und D in der WIPP-site mit bzw. ohne Erhitzer.

Im ersten Halbjahr 2015 wurden durch das IfG die zusätzlichen Untertagemessungen zur Bestimmung des Einspannungszustandes und der Dilatanz in Firste, Ulme und Sohle vor sowie im Bereich des Dammjoches in der Valberger Strecke der Grube Asse beendet.

Außerdem hat das IfG die Nachrechnungen der Laborversuche am „clean salt“ sowie am „argillaceous salt“ mit beiden Stoffmodellen weitgehend abgeschlossen und Modellierungsarbeiten zum Room D mit einer Reihe von Parametervariationen für ein besseres Verständnis der wesentlichen am Room D ablaufenden Verformungs- und Entfestigungsprozesse mit dem Günther/Salzer Modell durchgeführt.

Diese Untersuchungen belegen die Notwendigkeit, das Verständnis des Kriechverhaltens bei kleinen Deviatorspannungen, der beim Zugversagen ablaufenden Verformungs- und entfestigungsprozesse sowie des Spannungs-Verformungsverhaltens von Kontaktflächen zu vertiefen, wie das in einem weiteren Forschungsvorhaben der Projektgruppe vorgesehen ist.

Auf der 8th Conference on the Mechanical Behavior of Salt (May 26-28, 2015 in Rapid City, SD) wurde vom IfG ein Vortrag zu den Ergebnissen der Laborversuche an WIPP-salt („clean salt“) gehalten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr 2015 werden die Untertagemessungen zur Bestimmung des Einspannungszustandes und der Dilatanz am Dammjoch ausgewertet und der Vergleich mit den Modellierungsergebnissen unter Berücksichtigung der Verheilung durchgeführt.

Außerdem sollen die Nachrechnungen für die ungestörte Entwicklung um Room D sowie für die Erhitzerversuche im Room B mit beiden Stoffmodellen weitgehend abgeschlossen werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zu den IfG-Stoffgesetzen:

Lüdeling, C., Günther, R.-M., Knauth, M. & Minkley, W.: (2015): Healing of Rock Salt Damage and Applications. Paper prepared for presentation at the 49th US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium held in San Francisco, CA, USA, 28 June-1 July 2015.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1; Wirtsgestein Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 ersten Halbjahr 2015 wurden folgenden Arbeiten durchgeführt:

- Nachrechnung der Kriechversuche bei höheren Temperaturen (60 und 100 °C) und Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte zu den Salztypen „clean salt“ und „argillaceous salt“. Umfassender Vergleich des Verformungsverhaltens der untersuchten amerikanischen Steinsalztypen aus der WIPP mit dem Asse-Speisesalz.
- Durchführung von Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung bei Gebirgstemperatur sowie bei höheren Temperaturen in den ausgewählten In-situ-Strukturen „Room D“ und „Room B“ der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) in New Mexico (USA).
- Die Berechnung des „Room D“ Modells wurde beendet und im Rahmen der Workshops 17 und 18 wurde ein Vergleich der Ergebnisse der Simulationsrechnungen der Partner untereinander sowie mit vorhandenen In-situ-Daten aus Untertagemessungen von SANDIA präsentiert und diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr 2015 wird der Zuwendungsempfänger die vorhandenen Stoffmodelle erweitern, um die thermo-mechanischen Vorgänge bei der Untertagestruktur „Room B“ in der WIPP zu verbessern und beenden. Es folgt die Veröffentlichung der Ergebnisse des Verbundprojekts IV in Einzelberichten.

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.

HAMPEL, A. GÜNTHER R.-M., SALZER K., MINKLEY W., PUDEWILLS A., YILDIRIM S., ROKAHR R., GÄHRKEN A., MISSAL C., STAHLMANN J., HERCHEN K., LUX K.-H.: 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; pp. 349-358, Proc. of intern. Conf., Rapid City, SD, USA, May 26-28, 2015, L. Roberts, K. Mellegard & F. Hansen (eds.), CRC Press, Taylor & Francis Group (Balkema), ISBN: 978-1-138-02840-1

PUDEWILLS, A.: Numerical Analysis of a Drift Intersection in a Waste Repository in Rock. Mechanical Behavior of Salt VIII; pp. 419-425, Proc. of intern. Conf., Rapid City, SD, USA, May 26-28, 2015, L. Roberts, K. Mellegard & F. Hansen (eds.), CRC Press, Taylor & Francis Group (Balkema), ISBN:978-1-138-02840-1

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1; Wirtsgestein Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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

Mit dem anhand der Laborversuche ermitteltem Parametersatz zum WIPP–clean salt und – argillaceous salt wurden am einheitlichen Berechnungsmodell zum Room D in der WIPP-Site Simulationsberechnungen durchgeführt und die Ergebnisse bei den Projektworkshops vorgestellt und mit den Projektpartnern diskutiert.

Während des Berichtszeitraums wurde das angewendete Stoffgesetz mit dem Dehnungsverfestigungsansatz für Lubby2 nach Heusermann (1984) erweitert. Der Parametersatz zum WIPP-Salt wurde unter Berücksichtigung der Dehnungsverfestigung angepasst, die Laborversuche ein weiteres Mal nachgerechnet und die Simulationsberechnungen zum Room D erneut durchgeführt. Die Ergebnisse wurden den Projektpartnern vorgestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Berechnungen zur WIPP-Site sollen mit den Simulationsberechnungen zum Room B weitergeführt und weitestgehend abgeschlossen werden. Mit den Arbeiten am Endbericht soll begonnen 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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1; Wirtsgestein Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 (bisher 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 wurde vermehrt an der Simulation von Room D der WIPP gearbeitet. Als Vorbereitung wurde im Rahmen des Projekt-Workshops in Leipzig im Februar ein aktueller Stand der Nachrechnungen aller Laborversuche vorgestellt. Anhand dieser Versuche werden die Parameter für die In-situ-Berechnungen bestimmt. In Vorbereitung auf die Workshops in Braunschweig im März und Rapid City im Mai wurden vom Zuwendungsempfänger die Berechnungsergebnisse für Room D von allen Projektpartnern gesammelt und für einen Vergleich aufbereitet. Im Zuge der Tagung „The Mechanical Behavior of Salt VIII“ wurde das Stoffgesetz in einem Vortrag anhand der mathematischen Formulierung präsentiert. Anhand der Simulation von Kurzzeitfestigkeitsversuchen sowie Kriechversuchen und dem Vergleich mit den Laborergebnissen konnte die Vielseitigkeit und die gute Approximation mit einem einheitlichen Parametersatz gezeigt werden. Darüber hinaus wurden in einer gemeinsamen Veröffentlichung des Verbundprojekts Berechnungsergebnisse zum In-situ-Bauwerk Asse-Dammjoch gezeigt. Im Berichtszeitraum wurden das transiente und schädigungsinduzierte Kriechen weiterentwickelt, so dass bessere Übereinstimmungen im verfestigenden Verhalten und in der Dilatanzentwicklung erreicht werden können. Zudem sind in diesem Zusammenhang die empirischen Beziehungen des thermischen Verhaltens überprüft und geringfügig angepasst worden.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Zeit wird die Modellbildung zu Room B abgestimmt, da hier aufgrund widersprüchlicher Quellen zu den thermischen Materialeigenschaften und zur Wärmequelle ein für sämtliche Partner einheitliches Modell zu erstellen ist. Im Anschluss daran werden die ersten thermisch-mechanisch gekoppelten Berechnungen durchgeführt und ausgewertet. Abschließend sind ggf. Optimierungen vorzunehmen und die Ergebnisse zu vergleichen. Darüber hinaus wird mit der Erstellung des Abschlussberichtes begonnen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Gährken, A.; Missal, C.; Stahlmann, J. (2015): A thermal-mechanical constitutive model to describe deformation, damage and healing of rock salt. The Mechanical Behavior of Salt VIII, 26.-28.05.2015, Rapid City, SD, USA

Hampel, A.; Günther, R.-M.; Salzer, K.; Minkley, W.; Pudewills, A.; Yildirim, S.; Rokahr, R.; Gährken, A.; Missal, C.; Stahlmann, J.; Herchen, K.; Lux, K.-H. (2015): Joint Project III on the comparison of constitutive models for the thermomechanical behavior of rock salt I. Overview and results from model calculations of healing of rock salt. The Mechanical Behavior of Salt VIII, 26.-28.05.2015, Rapid City, SD, USA

Missal, C.; Gährken, A.; Stahlmann, J. (2015): Numerical investigations on the anisotropic damage of the EDZ of drifts in rock salt. The Mechanical Behavior of Salt VIII, 26.-28.05.2015, Rapid City, SD, USA

Missal, C.; Döring, I.; Stahlmann, J. (2014): Spannungs-Dehnungs-Verhalten von Steinsalz aus der flachen und steilen Lagerung. geotechnik, 37. Jahrgang, Heft 3, S. 177-184, Ernst & Sohn, Berlin, 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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3; Wirtsgestein: unabhängig	
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2011 bis 31.10.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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 Ausgabe-Größen besonders 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 Restarbeiten zu den ursprünglichen Arbeitspaketen konnten noch nicht vollständig abgeschlossen werden. Der Unterauftrag zur Entwicklung eines flexiblen Programmsystems zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse ist formal abgeschlossen, jedoch werden vom Auftragnehmer zurzeit noch Korrekturen am Programm vorgenommen. Die Arbeit aus dem Parallelprojekt NUMSA der TU Clausthal konnte noch nicht ausgewertet werden, da sie bislang nicht in abschließend dokumentierter Form vorliegt.

AP5: Auf der European Geosciences Union General Assembly (EGU2015, Wien, 12.-17. April 2015) gab es unter dem Sitzungstitel „Uncertainty, Sensitivity Analysis and Efficient Diagnostics in Geosciences“ eine Reihe von Fachvorträgen und Postern zu projektrelevanten Themen. Um das Projekt MOSEL im allgemeinen Kontext geowissenschaftlicher Forschung zu positionieren, wurde auf der Konferenz ein Poster präsentiert.

AP6: Die begonnenen Untersuchungen mit problemspezifisch separierten Stichproben wurden fortgeführt, einige Ergebnisse wurden im Rahmen des o. g. Posters präsentiert. Weiterhin wurde mit der Untersuchung der Möglichkeit begonnen, Sensitivitätsanalysen mithilfe einer numerisch effektiven Schätzfunktion (Metamodell), anstelle des Originalmodells durchzuführen. Dem Institut für Wissenschaftliches Rechnen der TU Braunschweig wurde der Auftrag erteilt, auf Basis eines Satzes von Rechenergebnissen, die mit dem in MOSEL verwendeten Modell für ein Endlager für schwach- und mittelaktive Abfälle im Salzgestein gewonnen wurden, ein solches Metamodell zu erstellen. Erste Ergebnisse liegen bereits vor und wurden mit dem Auftragnehmer diskutiert.

AP7: Im Hinblick auf eine internationale Zusammenarbeit im Bereich „Uncertainty Management“ wurden mehrere Telefonkonferenzen mit Galson Sciences und RWM / NDA (UK) durchgeführt. Ein internationaler Workshop zu der Thematik ist für September geplant.

AP8: An der Dokumentation der bisher durchgeführten Arbeiten wurde weitergearbeitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im AP5 ist im zweiten Halbjahr die Teilnahme an der Goldschmidt-Konferenz in Prag (16.-21. August 2015) geplant. Dort sollen die Ergebnisse einer Untersuchung vorgestellt werden, die im Rahmen von AP6 in projektübergreifender Zusammenarbeit mit dem Vorhaben LAVA2 geplant ist. Hierbei wird eine probabilistische Rechnung mit einem Rechenmodell für reaktiven Stofftransport durchgeführt und mit Methoden der Sensitivitätsanalyse ausgewertet. Ziel dieser Untersuchung ist, die Übertragbarkeit von bisher in MOSEL gewonnenen Erkenntnissen auf andere als die bisher betrachteten Modelltypen, die im Bereich der Endlagersicherheit jedoch relevant sind, zu testen und zu bewerten. Im AP6 ist weiterhin geplant, Sensitivitätsanalysen mit dem vom Institut für Wissenschaftliches Rechnen erstellten Metamodell durchzuführen. Hierbei ist zu prüfen, inwieweit ein solches, vom eigentlichen Rechenmodell unabhängiges, jedoch numerisch effektiveres Metamodell die originalen Sensitivitäten korrekt abzubilden imstande ist. Im AP7 soll die internationale Zusammenarbeit auf dem Gebiet des Umgangs mit Ungewissheiten im Safety Case weiter aktiv vorangetrieben werden. Ein Fachworkshop mit interessierten Partnern aus mehreren Ländern ist für September in Harwell (UK) geplant.

Im Rahmen von AP8 wird an der Dokumentation der bisherigen Arbeiten und Ergebnisse weitergearbeitet. Anders als zunächst vorgesehen wird auf die Veröffentlichung eines Zwischenberichts jedoch verzichtet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Spießl, S. M. and Becker, D.-A.: Investigation of the Manifold Sensitivities of a Final Repository Model with two Distinct Peaks in the Output Distribution. Poster auf der European Geosciences Union General Assembly (EGU2015, Wien, 12.-17. April 2015)

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10951
Vorhabensbezeichnung: Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1; Wirtsgestein: Salz	
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2011 bis 31.05.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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 am 17.12.2014 begonnene Diffusionsversuch am Probekörper Gorleben-8 mit einer Porosität von ca. 2 % wurde kontinuierlich fortgeführt. Nach 132 Tagen Versuchsdauer wurde erstmals der Tracer Cäsium im Senkenablauf nachgewiesen. Im Folgenden konnte Cäsium fortlaufend im Senkenablauf mit schwankenden Konzentrationen detektiert werden. Der Versuch wird fortgeführt.

Der Diffusionsversuch am Probekörper Gorleben-10 mit einer Porosität von ca. 4 % wurde am 25.02.2015 begonnen. Durch eine teilweise Drehung sowohl des Stempels als auch der Bodenplatte vor Versuchsbeginn wurde sichergestellt, dass der Kontakt des Probekörpers mit der Lauge über die gesamten Stirnflächen gegeben war. Nach 62 Tagen Versuchsdauer wurde erstmals der Tracer Cäsium im Senkenablauf nachgewiesen. Die Cäsiumkonzentration war zum Berichtszeitpunkt ca. eine Größenordnung niedriger als die Konzentrationen im Senkenablauf der Probekörper Gorleben-8. Erste Abschätzungen des Diffusionskoeffizienten werden erst möglich sein, sobald eine Durchbruchskurve über einen längeren Zeitraum mit deutlichem Trend vorliegt.

Der Diffusionsversuch am Probekörper Gorleben-11 mit einer Porosität von ca. 4 % wurde am 30.01.2015 gestartet. Auch hier wurden der Stempel und die Bodenplatte vor Versuchsbeginn gegen den Versuchskörper versetzt. Zudem wurde der Stempel um wenige mm vom Versuchskörper abgezogen. Bereits nach wenigen Tagen konnte erstmals Cäsium im Senkenablauf nachgewiesen werden. Nach ca. 120 Tagen Versuchsdauer liegt bislang eine Durchbruchskurve vor, die starke Schwankungen aufweist. Insgesamt kann jedoch ein Trend zu höheren Konzentrationen verzeichnet werden. Es wird vermutet, dass diese Konzentrationsschwankungen darauf zurückzuführen sind, dass durch Umkristallisationsprozesse vorhandene Transportwege verschlossen und neue geöffnet werden. Wenn ein Transportpfad verschlossen wird, sinkt die Konzentration im Senkenablauf kurzzeitig ab, bis ein neuer Transportpfad zur Verfügung steht und die Konzentration wieder ungefähr auf die zuvor verzeichnete Konzentration ansteigen kann und diese schließlich übersteigt.

Der Versuchskörper Gorleben-12 mit einer Porosität von ca. 2 % wurde bereits im zweiten Halbjahr 2014 kompaktiert. Bei der Aufsättigung und Bestimmung der Laugenpermeabilität kam es, vermutlich durch einen defekten Druckminderer, zum Auftreten eines erhöhten Laugendrucks, der im Folgenden die Laugenpermeabilität auf $1,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$ erhöhte. Die Versuchsdurchführung mit dem vorliegenden Kern wurde verworfen, weil vermutet wird, dass sich Wegsamkeiten gebildet haben, die eine advective Strömung im Versuchskörper nicht ausschließen lassen.

Ein Auftrag zum Umbau von den beiden nicht im Dauerversuch befindlichen Diffusionszellen wurde an Firma Heinemann, Braunschweig, vergeben. Der Umbau beinhaltet eine Erweiterung der inneren Bohrungen für Ab- und Zulaufschläuche auf 6 mm, eine Erweiterung der Anschlussgewinde von 1/8 " auf 1/4 " NPT und eine Vertiefung des Fräsbildes des Stempels und der Bodenplatte.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Fortsetzung der Versuche Gorleben-8 bis Gorleben-12; Analyse der gewonnen Proben, Auswertung der Ergebnisse

Kompaktion von zwei weiteren Probekörpern mit einmal ca. 2 % und zweimal ca. 1 % Porosität unter Verwendung von Abstandhaltern während der Kompaktion; Vorbereitung, Beginn und Durchführung der Diffusionsversuche

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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

Diffusionsversuch von Np(V) in kompaktiertem Na-Illit:

Es wurde ein Diffusionsversuch mittels der “through-diffusion technique” an Luft gestartet ($p\text{CO}_2 = -3.5$, 0.1 M NaCl). Die Dichte des Na-Illit beträgt hierbei etwa 1600 kg m^{-3} und der Kern ist in zwei Edelstahl-Filter eingebettet. Der Na-Illit stand für die Dauer von einem Monat mit 0.1 M NaClO_4 in Kontakt. Nach dieser Äquilibrierungszeit wurden die Reservoirlösungen ausgetauscht und durch eine Lösung (HCR, high concentration reservoir) mit $1.6 \times 10^{-5} \text{ M } ^{237}\text{Np}$ ($\sim 100 \text{ Bq cm}^{-3}$) und einer frischen 0.1 M NaClO_4 -Lösung (LCR: low concentration reservoir) ersetzt. Die Lösung im LCR wird täglich ausgetauscht, um die Tracer-Konzentration so gering wie möglich zu halten; bei jedem Austausch wird die Np-237-Konzentration mittels LSC (Liquid scintillation counting) bestimmt. Im HCR werden Proben alle 2-3 Tage genommen und die Abnahme der Konzentration an Np-237 verfolgt. Der Versuch wird in den nächsten Wochen beendet und ausgewertet.

Komplexierungsuntersuchungen:

Die Huminsäure-Komplexierung von Metallkationen (Am(III), Pu(IV), U(VI), Ca(II)) bei hohen Ionenstärken wurde mit den beiden Modellen Tipping Model VII und NICA-Donnan in Verbindung mit dem Ionen-Wechselwirkungsmodell SIT (Specific ion interaction theory) und dem Speziationscode Phreeqc versucht, theoretisch zu beschreiben. Hierzu wurde anstatt des ursprünglichen empirischen elektrostatischen Terms in Model VII (Constant Capacity Model) ein nicht-elektrostatisches Modell verwendet. Das NICA-Donnan-Modell wurde unverändert eingesetzt. Die Ergebnisse der Modellierung wurden verglichen mit experimentellen Resultaten der Protonendissoziation von HA und verschiedenen Metallionenkomplexierungsuntersuchungen für 1:1 Elektrolyte in NaCl, NaClO_4 , NaNO_3 -Lösungen mit Konzentrationen von 0.01 bis 3.5 m. Die hierbei extrapolierten Komplexierungskonstanten als Funktion der Ionenstärke geben die Trends der experimentellen Daten relativ gut wieder. Model VII und NICA-Donnan zeigen ähnliche Ergebnisse. Allerdings sind die Abweichungen der theoretischen Daten von den experimentellen Daten je nach experimentellen Bedingungen und Kation teilweise relativ groß (bis zu einer logK-Einheit). Für eine abschließende Bewertung müssen die Ergebnisse allerdings noch im Detail ausgewertet werden.

Sorptionsuntersuchungen:

Abschließende Auswertung der Np – und Pu-Sorptionsversuche, anfertigen der Manuskripte und Veröffentlichung in Peer-Review-Zeitschriften (s. u.).

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss des Np(V)-Diffusionsversuch und Auswertungen

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 Transaction 44, 3837-3844

R. Marsac, N. L. Banik, J. Lützenkirchen, R. A. Buda, J. V. Kratz, C. M. Marquardt (2015): Modeling plutonium sorption to kaolinite: accounting for redox equilibria and the stability of surface species. Chemical Geology 400, 1-10

R. Marsac, N. L. Banik, A. Diascorn, T. Kupcik, J. Lützenkirchen, C. M. Marquardt, T. Schäfer, D. Schild, J. Rothe, K. Dardenne, H. Geckeis (2015): Neptunium redox speciation at the illite surface. Geochimica et Cosmochimica Acta 152, 39-51

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 Komplexierungs-, 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)-Sorption aus salinaren Lösungen variierender Ionenstärke an synthetischen Behälterkorrosionsprodukten bei 25 °C
- Untersuchung der U(VI)-Sorption 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

- Der Ionenstärke (I)-Bereich der spektroskop. Unters. der U(VI)-Propionat-Komplexierung mittels UV/Vis, TRLFS und Continuous Wave spectroscopy wurde auf 0.75 bis 4 mol/kg NaClO₄ erweitert. Die abschließende Auswertung erfolgt aktuell mittels Parallel Factor Analysis (PARAFAC) und Anstiegsanalyse. Die Komplex-Stöchiometrie wird mittels FT-IR und ESI-TOF verifiziert.
- Für das System U(VI)/Montmorillonit wurden Oberflächenkomplexierungskonstanten (log k) mit 2SPNE-SC/CE-Modell in Abh. der I (0.1-3 mol/kg NaCl, CaCl₂) modelliert und mit Pitzer-Gleichung auf I = 0 extrapoliert. Log k-Werte der NaCl- und CaCl₂-Systeme lassen sich auf die gleichen log k₀-Werte extrapolieren. Sorptionsisothermen für gemischte Elektrolyte (2.52 mol/kg NaCl, 0.12 mol/kg CaCl₂, 0.048 mol/kg MgCl₂) lassen sich mit log kCaCl₂-Werten berechnen.
- U(VI)-Diffusion in kompaktiertem Montmorillonit in 3 mol/kg NaCl und gemischtem Elektrolyten gleicher Ionenstärke unter Ausschluss von CO₂ HTO-Diffusion in gemischtem Elektrolyten verläuft langsamer als in 3 mol/kg NaCl.
- Der Einfluss hoher I (NaCl, CaCl₂, MgCl₂ bis 4 M) auf das Mobilisierungspotential huminstoffartiger Tonorganika gegenüber Radionukliden wurde in binären und ternären Systemen aus [¹⁵²Eu]Eu(III), Fulvinsäure und Opalinuston bei pH 7 untersucht. Die Eu(III)-Fulvat-Komplexbildung wurde mittels Ultrafiltration und TRLFS quantifiziert. Es wurde nachgewiesen, dass hohe I nicht zu einer Verstärkung der mobilisierenden Wirkung höhermolekularer Tonorganika führen. Deren Einfluss lässt sich nach einem kombinierten K_d-Modell anhand der I-Abhängigkeit der WW in den binären Randsystemen z. T. quantitativ rekonstruieren.
- WW Pu(VI)+Pu(IV)-Polymere und Paenibacillus/Sporomusa sp.: Die Pu-Sorptionskapazität der Sporomusa sp. Zellen steigt mit dem pH. Bei [Pu]_{initial} 45 mg/L werden bei pH 3 nur 13 % gebunden, bei pH 7 hingegen 92 %. Die Maximalbeladung nach Langmuir von Pu an Zellen wurde bestimmt (bei pH 6: Sporomusa sp.: 230 mg Pu/g und Paenibacillus sp.: 140 mg Pu/g).
- WW Eu(III) und H. noricense: TRLFS-Spektren der Suspensionen (Inkubationszeit: 1 h als Funktion des pH) zeigen drei Hauptkomponenten. Die beiden mikrobiellen Eu(III)-Spezies (und/oder Komplexe mit freigesetzten Liganden) besitzen längere Lumineszenzlebensdauern (430 und 190 μs) als das Eu³⁺-Ion. Die Zellen reagieren auf niedrige und hohe pH-Werte sowie auf steigende Eu-Konzentrationen mit der Bildung von Agglomeraten.
- WW Cm(III) und H. noricense: TRLFS-Spektren der Suspensionen (Inkubationszeit: 1 h als Funktion des pH) zeigen ebenfalls drei Hauptkomponenten. Das Cm(III), gebunden an Zellen bzw. freigesetzten Liganden, besitzt deutlich längere Lumineszenzlebensdauern (335 u. 134 μs) als das Cm³⁺-Ion mit 68 μs. Verstärkte Agglomeration der Zellen bei niedrigen u. hohen pH-Werten.
- Bezüglich der Quantifizierung der PET-Daten und der Abbildungscharakteristik wurden ergänzende Modellexperimente durchgeführt. Hierdurch werden auch die Grenzen der Darstellbarkeit mikroskaliger Heterogenitätseinflüsse festgestellt. Die COMSOL-Simulation des beobachteten Prozesses wurde im Rahmen einer Masterarbeit abgeschlossen. Weiterhin wurden aus den umfangreichen Datenbeständen der Monte-Carlo-Simulationen einheitliche Parametersätze für die praktische Umsetzung einer Streukorrektur generiert und in einer Datenbank erfasst.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss der experimentellen Untersuchungen und Erstellung des Abschlussberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Krawczyk-Bärsch, E., Lütke, L., Moll, H., Bok, F., Steudtner, R., Rossberg, A.: A spectroscopic study on U(VI) biomineralization in cultivated *Pseudomonas fluorescens* biofilms isolated from granitic aquifers. *Environ. Sci. Pollut. Res.* 22, 4555-4565 (2015).

Kulenkampff, J., Gründig, M., Zakhnini, A., Lippmann-Pipke, J.: Process tomography of diffusion with PET for evaluating anisotropy and heterogeneity. *Clay Minerals* (under review).

Moll, H., Lütke, L., Cherkouk, A.: Bacterial diversity in clay and actinide interactions with bacterial isolates in relation to nuclear waste disposal. In: *Radionuclides in the Environment - Influence of Chemical Speciation and Plant Uptake on Radionuclide Migration*. Berlin, Springer Verlag (in press).

Gerasch, R.: Simulation und Parameterschätzung von ²²Na-Diffusion in einem Opalinuston-Bohrkern mittels COMSOL Multiphysics und GeoPET-Datenabgleich. Masterarbeit, BTU Cottbus-S. (2015).

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 31.08.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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

Zur Untersuchung des Einflusses zweiwertiger Kationen auf die Sorption von Pu(III) an Opalinuston (OPA) wurden im Anschluss an die Versuche in 0,1 M CaCl₂ Batchexperimente in MgCl₂-Lösungen durchgeführt. Bei diesen Versuchen wurde zuerst der Einfluss des pH auf die Sorption von 4 × 10⁻⁷ M Pu(III) an OPA (2 g/L) im pH-Bereich von 1-10 unter anaeroben Bedingungen in

0,1 M MgCl_2 und anschließend der Einfluss der Ionenstärke (0,01, 0,1, 1 und 2 M MgCl_2) beim pH-Wert der Sorptionskante (pH 5,5) studiert. Dabei zeigte sich, dass die Sorption stark vom pH-Wert abhängt. Nahezu vollständige Sorption wurde im pH-Bereich 6-10 festgestellt. Ein ähnlicher Sorptionsverlauf war bereits in CaCl_2 -Lösungen gefunden worden. Weiterhin wurde eine Übereinstimmung der Sorptionskurven von Pu(III) und des redoxstabilen Analogons Am(III) beobachtet. Mit steigender MgCl_2 -Konzentration nimmt die Sorption bei pH 5,5 kontinuierlich von 81 % (in 0,01 M MgCl_2) bis auf < 5 % (in 2 M MgCl_2) ab. Ähnlich wie in CaCl_2 -Lösungen liegt die Sorptionskante (50 % Sorption) von Pu(III) in MgCl_2 -Lösungen um etwa eine pH-Einheit höher als in 0,1 M NaCl. Außerdem ist die Ionenstärkeabhängigkeit der Sorption im MgCl_2 -Medium deutlicher ausgeprägt als in dem einwertigen Elektrolyten NaCl. Bei gleicher Konzentration des Elektrolyten ist die Sorption von Pu(III) in Gegenwart der Erdalkalitionen Mg^{2+} bzw. Ca^{2+} geringer als bei Anwesenheit von Na^+ -Ionen.

Zum Studium der Reversibilität der Sorption von 5×10^{-7} M Pu(III) an OPA (2 g/L) wurden Desorptionsversuche in 0,1 M NaCl-Lösung im pH Bereich 2-8 unter anaeroben Bedingungen durchgeführt. Dabei wurde festgestellt, dass in diesem pH-Bereich die Sorption von Pu(III) nicht vollständig reversibel ist. Mittels CE-ICP-MS wurde die Speziation des desorbierten Plutoniums in der Lösung bestimmt. Dabei wurde Pu(IV) als die Hauptspezies nach der Desorption bei pH 2 und pH 4 ermittelt. Zur Absicherung dieses Ergebnisses sind jedoch weitere Untersuchungen notwendig, um auszuschließen, dass es im Verlauf der CE-ICP-MS-Messung zu einer Oxidation von Pu(III) zu Pu(IV) kommt.

Während der Strahlzeit an der microXAS-Beamline der Swiss Light Source wurden zwei OPA-Bohrkerne vermessen, in die zuvor über einen Zeitraum von 61-82 Tagen Np(V) eindiffundiert war, wobei synthetisches OPA-Porenwasser (pH 7,6) als mobile Phase diente. In einem dritten Diffusionsexperiment mit Np(V) war 1 M NaCl bei pH 8,1 anstatt Porenwasser verwendet worden. Die mit μ -XRF gemessenen Diffusionsprofile zeigten eine Korrelation mit der Diffusionsdauer. Eine erste Auswertung der μ -XANES-Spektren an der Np L_{III} -Kante bestätigt das Ergebnis einer früheren Messung, dass das eingesetzte Np(V) während der Diffusion in den Bohrkernen zu Np(IV) reduziert wird.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Datenauswertungen und der Diffusionsexperimente mit Tc
- Anfertigung des Abschlussberichtes

5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Lübke: Migration von Technetium in natürlichem Tongestein, 2015 (Dissertation).

V. Schneiders: Redoxspeziation von Plutonium bei der Sorption an Tongestein mittels CE-ICP-MS, 2015 (Diplomarbeit).

P. Schönberg, D. Schönenbach, S. Zeisel, N. Trautmann, P. Thörle-Pospiech, J. Runke, C. Mokry, T. Kron, K. Wendt, T. Reich: Resonance Ionization Mass Spectrometry for ultra-trace analysis of technetium, Vortrag auf der DPG-Frühjahrstagung, 23.-27.03.2015, Heidelberg.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.09.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 konnten die Sorptionsuntersuchungen mit Europium (Eu(III)) abgeschlossen werden. Dabei wurden auch die fehlenden Sorptionsisothermen im ternären System mit Huminsäuren bei erhöhter (1 M) und niedriger Ionenstärke (0,01 M) ergänzt. Hier zeigt sich, dass unter fast allen Bedingungen (0,01 und 1 M NaCl, pH5 und 7) die Huminsäure die Mobilität des Europiums erniedrigt. In Gegenwart von erhöhten Calciumkonzentrationen (50 mM) nimmt dieser Effekt jedoch wieder ab. Eine Erklärung liefert hier die zusätzliche Ausfällung des Europiums mit der Huminsäure, was zu einer Abnahme der Mobilität führt. Wird die Calciumkonzentration jedoch erhöht, ist so viel Calcium in Lösung, dass hauptsächlich Calcium mit der Huminsäure ausfällt und das Europium in Lösung bleibt und am Ton sorbieren kann.

Neben den Untersuchungen mit Europium wurden Sorptionsisothermen von Uran (U(VI)) für Opalinuston (OPA) bei verschiedenen Ionenstärken (0,01 bis 5,0 M) und pH-Werten (pH5 und 7) aufgenommen. Neben dem Einfluss unterschiedlicher Konzentrationen (5 bis 50 mM) an zweiwertigen Konkurrenzionen (Calcium) wurde auch der Einfluss von Aldrich-Huminsäure untersucht. Die Untersuchungen im binären System (Me-OPA) haben gezeigt, dass zwischen pH5 und pH7 kaum Unterschiede zu erkennen sind. Eine Erhöhung der Ionenstärke von 0,01 M NaCl auf 1 M führt im Gegenzug eher zu einer Erhöhung der Uran Mobilität. Der Einfluss des Calciums ist bei pH5 annähernd gar nicht zu erkennen. Bei pH7 führt die Erhöhung des Calcium Gehaltes zu einer starken Erhöhung der Mobilität. Dieser Effekt kann mit der Bildung des neutralen aquatischen Komplexes $\text{Ca}_2\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3(\text{aq})$ bei pH-Werten > 7 erklärt werden, welcher nicht am Ton sorbiert. Dieser Effekt ist bei beiden ausgewählten Ionenstärken zu beobachten. Im ternären System bei pH7 und niedriger Ionenstärke reduziert die Huminsäure die Sorption des Urans am Opalinuston, vermutlich durch die Bildung eines Uran-Humat-Komplexes. In Gegenwart von Calcium nimmt die Sorption wieder zu, was vermutlich damit zusammen hängt, dass die Bildung des neutralen aquatischen Uranyl-Carbonato-Komplexes durch die Gegenwart der Huminsäure verhindert wird und der Uranyl-Humat-Komplex mit dem Calcium ausfällt. Steigt die Konzentration an Calcium weiter an, wird das Uran aus dem Humat-Komplex verdrängt und es kann sich wieder der neutrale aquatische Uranyl-Carbonato-Komplex bilden, welcher nicht am Ton sorbiert. Bei hoher Ionenstärke wird das Humat durch Natriumionen neutralisiert, woraufhin dieses das Uran nicht komplexieren kann. Somit wird eine Ausfällung des Urans als Uranyl-Humat verhindert. Steigt die Calcium Konzentration an, wird ein ähnlicher Effekt beobachtet wie in Abwesenheit von Huminsäure bzw. Humat. Es bildet sich der neutrale Uranyl-Carbonato-Komplex, welcher zu einer erhöhten Mobilität des Urans führt.

Darüber hinaus wurden in miniaturisierten Säulenexperimenten (MSE) mittels LC-ICP-MS-Kopplung dynamische Sorptions-Desorptions-Untersuchungen an Opalinuston (OPA) durchgeführt. Die Untersuchungen erfolgten mit Milli-Q-Reinstwasser als Laufmittel. Durch wiederholte Injektionen von jeweils 1,5 µg Europium (als Europiumperchlorat-Lösung) wurden schrittweise Durchbruchkurven von Europium aufgenommen und Europium bis zur Sättigung an OPA sorbiert. Zuvor sorbiertes Europium kann sukzessive durch Aluminiuminjektionen verdrängt werden. Darüber hinaus verdrängt 2 mM Aluminium (durch 2 mM Europium nicht desorbierbares) natürliches Uran vom Ton. Die ansteigende Sorptionsaffinität an Opalinuston in der Reihe Europium – Uranyl – Aluminium kann also unter Anwendung von MSE bestätigt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der Verlängerung werden die experimentellen Untersuchungen abgeschlossen und mit der Erstellung des Abschlussberichtes begonnen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Hahn, R., Hein, C., Kautenburger R., Kickelbick G. (2015): Influence of ionic strength on the complexation behavior of Eu(III) and U(VI) analyzed by ultrafiltration (Poster), European Winter Conference of Plasma Spectrochemistry, Münster, Germany.

Hein, C., Sander J.M., Kautenburger R., Kickelbick G. (2015): Sorption experiments with high salinity – Application of time resolved ICP-MS measurements (Poster), European Winter Conference of Plasma Spectrochemistry, Münster, Germany.

Kautenburger, R., Hein, C., Sander, J.M., Beck, H. P., Kickelbick, G. (2015): Metal speciation and mobility in clay - From ICP-MS batch and CE-ICP-MS speciation to miniaturised clay column experiments (MCCE) using LC-ICP-MS (Vortrag), European Winter Conference of Plasma Spectrochemistry, Münster, Germany.

Sander J.M., Hein, C., Kautenburger R., Kickelbick G. (2015): Fast miniaturised column experiments as linker between batch and diffusion experiments for host rock characterisation of final disposal sites in clay (Poster), European Winter Conference of Plasma Spectrochemistry, Münster, Germany.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 31.08.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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: Konkurrenzadsorption; AP1.3: Eisensubstituierte Tonminerale; AP2.1: Komplexe einfacher Carboxylate; AP2.2: Wechselwirkung mit Tonorganika; AP2.3 Boratester.

Modellierungen zur Adsorption von Actiniden auf Montmorillonit (AP1.1) wurden für U(VI) und Np(V) fortgeführt und auf einfach-deprotonierte Adsorptionsplätze ausgedehnt. Optimierte Strukturen von Np(V)-Komplexen auf zweifach-deprotonierten (110)-Kantenflächen wurden mittels des kürzlich entwickelten simulierten Temperns verbessert, um aussagekräftigere Energien zu erhalten. Wesentliche Resultate wie eine bevorzugt 4-fache Koordination

sowie neben bidentaten auch monodentate Adsorptionskomplexe wurden bestätigt. Np(V) bindet bevorzugt monodentat an SiO sowie bidentat auf dem AlOH-SiO-Platz, der auch für U(VI) besonders stabil ist. Im Gegensatz zu U(VI) wurde für Np(V) nur selten Monohydroxid als Adsorbat erhalten. Obwohl auch für Np(V) eine ionische Bindung anzunehmen ist, ergab sich eine schwächere Korrelation als für U(VI) zwischen den Ladungen der Oberflächensauerstoffe O_s und der Bindungslänge Np- O_s . Auf der einfach-deprotonierten (110)-Kantenfläche ergaben sich für U(VI) nahezu energetisch entartete Komplexe auf den Plätzen AlO_mOH , AlOH-SiOH und SiO als bevorzugt. Np(V), für das dieselben Plätze erhalten wurden, bindet jedoch bevorzugt an SiO. Erstmals wurde ein polarisierbares Kontinuumsmodell (PCM) zur Solvation von Oberflächen an exemplarischen U(VI)- und Np(V)-Komplexen erprobt. Bevorzugte Spezies wurden bestätigt, jedoch fallen Energieunterschiede zwischen Spezies für PCM geringer aus. Die Adsorption von Ca^{2+} auf der (110)-Kantenfläche wurde als Konkurrenz zur Actinidenadsorption betrachtet (AP1.2). Ca^{2+} adsorbiert bevorzugt auf Aluminolplätzen. Die Adsorption auf Silanolplätzen fällt um ~ 40 kJ/mol schwächer aus. Ergebnisse für Mg^{2+} deuten auf bevorzugte Silanolplätze hin. Weiterhin wird derzeit die Adsorption von U(VI) an Fe-Substitutionen in Montmorillonit modelliert (AP1.3).

Modellierungen zur Komplexierung von Np(V) und Am(III) mit leichten Tonorganika (AP2.1) wurden mit dem Ziel Koordinationsmoden und Isomere zu bestimmen fortgesetzt. Für Np(V) wurde die Untersuchung von Formiat- und Acetatkomplexen um Diformiat- und Diacetatspezies ergänzt. Für Np(V)-Diformiat ist die auch für U(VI) und Am(III) berechnete und für Formiat typische monodentate Koordination bevorzugt. Bei Np(V)-Monoformiat sind beide Koordinationsmoden im Gleichgewicht. Für zwei Acetatliganden wurde nur ein geringer Energieunterschied zwischen Isomeren mit einem mono- und einem bidentat gebundenen Liganden und einer Spezies mit zweibidentat koordinierten Liganden berechnet. Hier ist damit wie für U(VI) im Gleichgewicht von mehreren Isomeren auszugehen. Ergänzt werden diese Untersuchungen derzeit durch Rechnungen zu Am(III)-Diformiat. Für U(VI) und Np(V) wurden Monolactatkomplexe mit mono-, bidentater und Chelatkoordination berechnet (AP2.2). Während für U(VI) nur geringe Energieunterschiede zwischen den Isomeren bestehen, deuten erste Ergebnisse für Np(V) auf eine bevorzugt bidentate Koordination. Die kontrovers diskutierte Deprotonierung der OH-Gruppe des Lactats ist für U(VI) mit etwa 60 kJ/mol endotherm. Modellierungen zu Boratestern (AP2.3) konnten um Am(III)-Monosalicylatoborat erweitert werden. Diese bevorzugt monodentaten Komplexe bestätigen Ergebnisse zu Lactatoborat, dass Boratester schwächer komplexieren als Monoborat.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.3: Eisensubstituierte Tonminerale; AP2.1: Einfache Carboxylate; AP2.3: Boratester

5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch: Uranyl adsorption on solvated edge surfaces of 2:1 smectites. A density functional study. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17 (2015) 13757.

Poster Bunsentagung 2015, 14.-16.5.2015, Bochum, A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch: Modeling U(VI) adsorption on solvated mineral surfaces.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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

Es wurden die Lumineszenz-Messungen zum „Tiefemperaturbereich“ ($T < 273 \text{ K}$) für Tb(III), Sm(III) sowie Dy(III) als Lanthanoide in Komplexen mit verschiedenen niedermolekularen organischen Liganden durchgeführt. Die verwendeten Lanthanoid-Ionen unterschieden sich in der Zahl der f-Elektronen und folglich auch in ihren spektroskopischen Eigenschaften. Die Temperaturabhängigkeit der aus den zeitaufgelösten Lumineszenzspektren erhaltenen Abklingzeiten wurde für die Bestimmung der Aktivierungsenergien für verschiedene Deaktivierungsprozesse der Lanthanoid-Lumineszenz herangezogen. Komplementär wurden weitere Messungen der Lumineszenz-Quantenausbeuten bei Raumtemperatur und 80 K für Vertreter aus den Ligandgruppen A bis C durchgeführt. Die Löschung der Lanthanoid-Lumineszenz durch den Liganden ist abhängig vom jeweiligen Lanthanoid-Ion, z. B. ist die beobachtete Reduktion der Lumineszenz in Europium(III)-Komplexen stärker als für die entsprechenden Terbium(III)-Komplexe. Andererseits ist die beobachtete Energietransfereffizienz bei sensibilisierter Anregung vom Liganden auf das Lanthanoid-Ion für Terbium(III)-Komplexe von den betrachteten Lanthanoid-Ionen am größten. Die Arbeiten haben gezeigt, dass für die Lanthanoid-Komplexe aus dem Gesamtpool der strahlungslosen Deaktivierungsprozesse aus der jeweils spezifischen Kombination aus Ln-Ion und Ligand ein dominanter Prozess resultiert. Generell ist in aquatischen Systemen immer der strahlungslose Energietransfer auf die OH-Schwingung des Wassers aktiv und durch eine sehr kleine Aktivierungsenergie charakterisiert. Für effiziente Deaktivierung durch organische Liganden müssen sich Redox- bzw. Triplettenergie desselben und die physikochemischen Eigenschaften des Lanthanoids (z. B. Energielücke) komplementieren. In diesem Fall werden deutliche Temperatureinflüsse, gleichbedeutend mit einer größeren Aktivierungsenergie gefunden.

Zeitaufgelöste Lumineszenz-Messungen auf Komplexe zwischen Lanthanoid-Ionen und natürlicher organischer Liganden bzw. Modellpolymere wurden durchgeführt. Dabei wurden Lumineszenzabklingzeiten wie auch zeitaufgelöste Emissionsspektren bestimmt. Es wurden dazu neue Modellliganden (die als Basiselemente aromatische Untereinheiten wie auch Carboxylfunktionen als Binder für Metallionen enthalten) mit unterschiedlichen Molekulargewichten hergestellt. Die Lumineszenz der Lanthanoid-Ionen (s. o.) wurde in den spektroskopischen Untersuchungen in Abhängigkeit der Ionenstärke und Temperatur gemessen.

Die Arbeiten zur TIRF-Mikroskopie mit Lanthanoiden wurden weitergeführt. Messungen gemeinsam mit dem KIT-INE am TIRF-Mikroskop hatten gezeigt, dass die Integration weiterer Komponenten an ein Mikroskop-System die Aussagekraft orts aufgelöster Messungen an Tonproben deutlich erhöhen kann. Daher wurde der Mikroskop-Aufbau mit einem Spektrographen, ausgestattet mit einer sehr empfindlichen EMCCD, erweitert. Hierdurch ist jetzt zusätzlich zur Abklingzeit das Emissionsspektrum der Lanthanoid-Lumineszenz in TIRF-Messungen zugänglich. Messungen an Referenzsystemen zur Basischarakterisierung wurden durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die experimentellen Arbeiten sind abgeschlossen. Derzeit findet die abschließende Auswertung der erhaltenen Daten der Arbeitspakete A1 bis A3 statt. Im Anschluss wird der Abschlussbericht erstellt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Tobias Garling: Schwingungsspektroskopische Untersuchung der Adsorption aliphatischer Carbonsäuren auf Tonmineralien, Masterarbeit, Universität Potsdam, 2015.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 31.08.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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:

- Fortsetzung und vorläufiger Abschluss der Arbeiten zur Eu(III)-Polyborat Komplexierung in Abhängigkeit der Ionenstärke und Elektrolytmedien.
- Generell ist mit steigender Ionenstärke eine Abnahme der Eu(III)-(Poly)borat-Komplexierung zu beobachten. Im $\text{CaCl}_2/\text{MgCl}_2$ -Medium tritt die Konkurrenzreaktion $\text{Ca}^{2+}/\text{Mg}^{2+}$ -(Poly)boratbildung bei höheren Ionenstärken auf und ist zu berücksichtigen. Hohe Ca^{2+} - und Mg^{2+} -Konzentrationen vermindern und verhindern die Eu(III)-(Poly)borat-Feststoffbildung. Im KCl-Medium kommt es ab ~ 0.5 m KCl zur Bildung von Kristallen (vermutlich die Bildung einer Kalium-Borat Phase, Strukturanalyse in Arbeit).
- Für die Reaktion $\text{Eu}^{3+} + \text{B}^- \rightarrow \text{EuB}^{2+}$, ($\text{B} = (\text{Poly})\text{borat}$) wurden ein $\log\beta_{11}^0$ von 3.15 ± 0.21 (2s) und folgende SIT-Parameter abgeleitet (ϵ -Werte in [kg/mol]): NaCl-Medium: $\Delta\epsilon = (-0.14 \pm 0.04)$, $\epsilon(\text{EuB}^{2+}, \text{Cl}^-) = 0.02$; NaClO_4 -Medium: $\Delta\epsilon = (-0.12 \pm 0.05)$, $\epsilon(\text{EuB}^{2+}, \text{ClO}_4^-) = 0.3$ unter Einbeziehung folgender Literaturwerte $\epsilon(\text{Na}^+, \text{B}(\text{OH})_4^-) = -0.07$, $\epsilon(\text{Am}^{3+}, \text{Cl}^-) = 0.23$ bzw. $\epsilon(\text{Am}^{3+}, \text{ClO}_4^-) = 0.49$ [Hummel et al., Chem. Thermodynam. 9, Elsevier, Amsterdam (2005)].
- Untersuchung zur Cm(III)-(Poly)borat Komplexierung bei $I = 0.1$ m (NaCl) mittels TRLFS: Es wurde eine Komplexierungskonstante von $\log\beta_{11}$ ($I = 0.1$ m) ~ 2.4 bestimmt.

AP2:

- Die Cm-Lactat-Komplexierung wurde ergänzend zu die Arbeiten der TU Heidelberg (P. Panak) mit TRLFS in Abhängigkeit der Ionenstärke (0.1 – 2 m NaCl) untersucht. Folgende Werte wurden mittels SIT ermittelt: $\log\beta_{11}^0 = 3.64 \pm 0.09$ mit $\Delta\epsilon_1 = -0.23 \pm 0.06$ mol/kg und $\log\beta_{12}^0 = 7.16 \pm 0.18$ mit $\Delta\epsilon_2 = -0.27 \pm 0.12$ kg/mol, abgeleitet wurden die folgenden Wechselwirkungskoeffizienten $\epsilon(\text{CmLac}^{2+}, \text{Cl}^-) = 0.05 \pm 0.06$ kg/mol und $\epsilon(\text{CmLac}^{2+}, \text{Cl}^-) = 0.06 \pm 0.12$ kg/mol. Fluoreszenzlebenszeitmessungen wurden ebenfalls durchgeführt. Es ergibt sich ein kontinuierlicher Anstieg der Lebenszeit mit zunehmender Lactatkonzentration von $\tau = 68$ μs ($n_{\text{H}_2\text{O}} = 8.7 \pm 0.5$) für das Cm-Aquaion bis auf 100 - 105 μs ($n_{\text{H}_2\text{O}} = 5 - 6$) am Ende der Lactattitration (Mittelwert aller Ionenstärken).
- Erste Untersuchungen zur Bestimmung der Fällungsenthalpie eines Feststoffes mithilfe der ITC wurden am Beispiel von Silberiodid und Nd_2O_3 getestet. Silberiodid zeigt mit $-93,01$ kJ/mol ($T = 30$ °C) gute Übereinstimmung mit Literaturwerten (-110 kJ/mol bei $T = 25$ °C). Das Neodym-Oxalat-System zeigt eine Enthalpie von rund -18 kJ/mol, welche durchaus realistisch ist, jedoch durch den hohen Untergrund der Messungen verfälscht sein könnte. Eine exakte Auswertung ist in Arbeit.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Publikation zu den ITC-Messungen des Eu/Cm-Lactat-Systems in Zusammenarbeit mit Andrej Skerenak-Frech (Uni Heidelberg)
- Abschluss der experimentellen Arbeiten zum Am/Cm-Polyboratsystem und zur Titrationskalorimetrie (u. a. Bestimmung der Fällungsenthalpie des 2:3- Nd-Oxalat-Feststoffes)
- Erstellung des Abschlussberichtes

5. Berichte, Veröffentlichungen

Open Access: J. Schott, J. Kretzschmar, S. Tsushima, B. Drobot, M. Acker, A. Barkleit, S. Taut, V. Brendler, T. Stumpf: "The interaction of Eu(III) with organoborates – a further approach to understand the complexation in the An/Ln(III)-borate system", Dalton Transactions, 2015, 44, 11095-11108, DOI: 10.1039/C5DT00213C, Paper

F. Taube, M. Müller, M. Acker, S. Taut und T. Stumpf: "An ITC study on protonation reactions and on the Eu-lactate complexation at high ionic strength", ABC-Salt IV Workshop, Heidelberg, 14.-15.04.2015, Poster + erweitertes Abstract

J. Schott, J. Kretzschmar, M. Acker, A. Barkleit, S. Taut, V. Brendler, T. Stumpf: The Ionic Strength Dependency of the Eu(III)-(Poly)borate Complexation in different Salt Media, ABC-Salt IV Workshop, Heidelberg, 14.-15.04.2015, Poster + erweitertes Abstract

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 Komplexierung von Am(III) mit Lactat wurde mittels EXAFS-Spektroskopie als Funktion des pH-Wertes untersucht. Die strukturellen Daten der Am(III)-Lactat-Komplexe (Koordi-

nationszahlen, Bindungslängen) wurden ermittelt und durch thermodynamische Speziationsrechnungen sowie iterative Faktoranalyse komplementiert. Die Ergebnisse zeigen, dass bei sehr niedrigen pH-Werten (0.9 – 2.1) lediglich das Am(III)-Aquoion vorliegt. Im pH-Bereich von 3.0 – 5.2 ist eine kontinuierliche Zunahme an Kohlenstoffatomen in der zweiten Koordinationssphäre des Am(III)-Ions zu erkennen, was auf eine Verschiebung der Speziation zu höher komplexierten Am(III)-Lactat-Spezies schließen lässt. Bei dem höchsten untersuchten pH (6.4) erfolgt wiederum eine leichte Abnahme an koordinierten C-Atomen, was auf eine zunehmende Konkurrenzreaktion mit Hydroxid-Ligand zurückzuführen ist. Diese Ergebnisse sind in sehr guter Übereinstimmung mit der anhand literaturbekannter Stabilitätskonstanten errechneten Speziation. Die Bindungslängen der koordinierten und distalen C-Atome liegen konstant bei 3.41 – 3.42 Å bzw. 4.32 – 4.36 Å und zeigen keine pH-Abhängigkeit. Diese Werte sind typisch für eine side-on-Koordination von Am(III) durch Lactat und bestätigen, dass Lactat über den gesamten untersuchten pH-Bereich sowohl über die Carboxyl-Gruppe als auch über den Sauerstoff der α -Hydroxy-Gruppe koordiniert ist und einen 5-gliedrigen Chelating bildet. Die Ergebnisse ermöglichen zum einen detaillierte Einblicke in die Struktur der Am(III)-Lactat-Komplexe und zeigen zum anderen, dass das entwickelte thermodynamische Modell auch auf endlagerrelevante pH-Werte anwendbar ist.

Die Komplexierung von Cm(III) mit Formiat wurde mittels TRLFS in wässrigen NaCl-Lösungen bei $T = 20 - 90$ °C untersucht. Die Ergebnisse zeigen das Auftreten von zwei Cm(III)-Formiat-Spezies ($[\text{Cm}(\text{Form})_n]^{3-n}$, $n = 1, 2$). Des Weiteren ist bei hohen Temperaturen und hohen Ligandkonzentrationen auch die Bildung des $[\text{Cm}(\text{Form})_3]$ Komplexes als minore Spezies zu beobachten. Sowohl $\log K^0_1(20 \text{ °C}) = 2.12 \pm 0.06$ als auch $\log K^0_2(30 \text{ °C}) = 1.23 \pm 0.46$ sind um eine logarithmische Einheit kleiner als die analogen Werte für die Cm(III)-Acetat- und Propionat-Systeme. Der $\log K^0_1(T)$ steigt im untersuchten Temperaturbereich um 0.5 logarithmische Einheiten an. Die Temperaturabhängigkeit von $\log K^0_2(T)$ ist deutlich stärker ausgeprägt und der Wert nimmt um eine logarithmische Einheit zu. Für beide Komplexe wurden positive Werte für die Standardreaktionsenthalpie und -entropie ermittelt. Somit sind beide Komplexierungsreaktionen endotherm und entropiegetrieben. Dies steht in sehr guter Übereinstimmung mit den analogen Cm(III)-Acetat- und -Propionat-Systemen. Im Vergleich zu Acetat und Propionat ist Formiat jedoch ein deutlich schwächerer Ligand für dreiwertige Actiniden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Abschlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

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, 54, 1860-1868.

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. Sync. Rad.*, 2015, 22, 99-104.

Fröhlich, D.R., Skerencak-Frech, A., Kaplan, U., Koke, C., Rossberg, A., Panak, P.J.: An EXFAS spectroscopic study of Am(III) complexation with lactate, *Dalton Trans.*, 2015, 43, 15593-15601.

Fröhlich, D.R., Skerencak-Frech, Panak, P.J.: Complex formation of Cm(III) with formate studied by time-resolved laser fluorescence spectroscopy, *Appl. Geochem.*, submitted.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2011 bis 31.03.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 31.03.2015	
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 Endlagereinwirkungen 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↔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

- AP18: Vorstellung der Ergebnisse der Vergleichsberechnungen mit der GRS Braunschweig im Rahmen eines Posters auf der 6. internationalen Konferenz „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“ in Brüssel.
 AP21: Literaturrecherche zu Informationen über die am geplanten Benchmark-Vergleich beteiligten Simulatoren der Partnerorganisationen sowie zu Beispielmodellen (AP22).
 AP22: Ausformulierung der Benchmark-Beispielmodelle. Eine Abstimmung mit den Partnerorganisationen ist nach Absprache mit dem PTKA-WTE aufgrund der zum Projektauslaufdatum noch nicht beschlossenen Förderabsicht des BMWi noch nicht erfolgt.
 AP19/23: Fertigstellung des Abschlussberichts.

4. Geplante Weiterarbeiten

Projektende.

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. Posterpräsentation auf der 6. internationalen Konferenz „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“, ONDRAF/NIRAS, 23.-26. März 2015, Brüssel, Belgien.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2011 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 10 ganztägige Arbeitsgespräche mit den drei am Projekt beteiligten Organisationen durchgeführt. Die diskutierten Inhalte betrafen vor allem die Erarbeitung des FEP-Katalogs für das Endlagerstandortmodell Süd sowie den Abschluss der Szenari-entwicklung für das Endlagerstandortmodell Nord. Die Arbeiten in den Arbeitspaketen waren:

AP1: Diskussion des Endlagerstandortmodells Süd.

AP3: Erstellung des FEP-Katalogs für das Endlagerstandortmodell Süd.

Die Methodik zur Erstellung des FEP-Katalogs und die Festlegung der zu beschreibenden Inhalte wurden weiterentwickelt.

Der FEP-Katalog für das Endlagerstandortmodell Süd enthält 67 FEP, wovon 24 FEP Zustände und 73 FEP Prozesse beschreiben. 27 der FEP des FEP-Katalogs wurden von der GRS erstellt. Dabei wurden jeweils sowohl die Inhalte beschrieben, als auch die Wechselwirkungen bzw. Nicht-Wechselwirkung mit allen anderen FEP des FEP-Katalogs bestimmt und inhaltlich begründet.

Die von den beiden anderen Projektpartnern erstellten 40 FEP wurden kommentiert. Alle FEP wurden in den gemeinsamen Sitzungen durchgesprochen und die FEP anhand der Anmerkungen überarbeitet.

AP5: Ein Berichtsbeitrag zum Konzept des radiologischen Nachweises wurde erstellt. Die Datenlage für die Endlagerstandortmodelle und die Relevanz der Daten für die Rechnungen zum radiologischen Nachweis der Langzeitsicherheit wurden bewertet und die Bewertungen in einem Berichtsbeitrag dokumentiert. Die Berichtsbeiträge wurden diskutiert und anhand der Anmerkungen überarbeitet.

Es wurden für das Endlagerstandortmodell Nord Rechnungen zum Transport gelöster Radionuklide durch das Wirtsgestein mit CLAYPOS und zur Ausbreitung von gasförmigen Radionukliden mit dem Programm TOUGH2 durchgeführt und in einem Berichtsbeitrag dokumentiert.

Die langzeitsicherheitsanalytischen Modellierungsarbeiten zum AP5 sind damit weitgehend abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Diskussion der Daten für die Modellparameter am Endlagerstandortmodell Süd.

AP3: Überprüfung des FEP-Katalogs für das Endlagerstandortmodell Süd auf Konsistenz der Inhalte und FEP-Verknüpfungen.

Beginn der Szenari-entwicklung für das Endlagerstandortmodell Süd. Dabei ist im ersten Schritt das Konzept zur Szenari-entwicklung an die Erweiterungen des FEP-Katalog anzupassen, die für das Endlagerstandortmodell Süd gegenüber jenem für das Endlagerstandortmodell Nord vorgenommen wurden.

AP7: Diskussion und Vergleich der von den anderen Projektpartnern und der GRS erarbeiteten Ergebnisse.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2011 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 FEP-Katalog für das Endlagerstandortmodell SÜD weitestgehend fertig gestellt. Dieser Katalog stellt eine signifikante Weiterentwicklung des FEP-Kataloges für das Endlagerstandortmodell NORD dar. Ein wesentliches Merkmal dieses FEP-Kataloges ist die strikte Trennung zwischen FEP, die Endlagerkomponenten beschreiben wie Ausbauten, geotechnische Barrieren, Wirtsgestein etc. und FEP, die ablaufende THMCB-Prozesse im und um das Endlager beschreiben. Auf diese Weise kann immer eindeutig ein Prozess mit seiner Wirkung auf einzelnen Komponenten identifiziert werden. Auf der anderen Seite wurde den Komponenten-FEP eine Reihe von Eigenschaften zugeordnet, die, wenn diese sich im Laufe der Entwicklung ändern, auch wiederum die Prozess-FEP in ihrer Ausprägung verändern können.

Auch für diesen FEP-Katalog wurde wieder seitens DBETEC eine FEP-Datenbank (Access) entwickelt, mit deren Hilfe eine systematische Dokumentation des FEP-Kataloges genauso möglich ist, wie eine automatisierte Konsistenzüberprüfung der Verknüpfungen einzelner FEP. Diese Datenbank liefert die Grundlage für die anschließende Szenarienanalyse.

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

4. Geplante Weiterarbeiten

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M. & Meleshyn, A. (2015): Evaluation of temperature-induced effects on safety-relevant properties of clay formations with regard to HLW disposal, Mineralogical Magazine, Twickenham, UK (accepted for publication).

Shushakova, V., Jobmann, M., Wolf, J. (2015): Influence of intrinsic material parameters on fluid pressure build-up and two-phase flow phenomena in a deep HLW repository in claystone, 6th International Conference "Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement", Brussels, March 23-26.

Jobmann, M., Maßmann, J., Meleshyn, A., Polster, M. (2015): Criteria for demonstrating the integrity of the geological barriers in claystone in Germany, 6th International Conference "Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement", Brussels, March 23-26.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2012 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 Szenarientwicklung „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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3, Wirtsgestein: unabhängig		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2012 bis 31.10.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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

Wegen des geplanten Projekt-Abschlussworkshops im Rahmen einer vom 28.9.-1.10. stattfindenden Konferenz wurde die Projektlaufzeit bis zum 31. Oktober kostenneutral verlängert.

Am 17. Februar fand das sechste Projekt-Statusgespräch beim G-CSC in Frankfurt statt. Die Arbeitsgruppen stellten die Ergebnisse ihrer bisherigen Arbeit vor und verständigten sich über das weitere Vorgehen und die Erstellung des Abschlussberichtes.

Inzwischen sind fast alle Bestandteile von d^{3f} und r^{3t} in ug4 überführt. Weitere Testversionen von ug4 wurden bei der GRS installiert und intensiv getestet. Dabei wurden sowohl die LUA-Skriptsprache als auch das graphische Benutzerinterface benutzt. Mit Hilfe der LUA-Skripts sind bereits alle Features von d^{3f} steuerbar. Das Konzept für das graphische Benutzerinterface wurde auf Basis der Tests im intensiven Austausch mit den Entwicklern noch einmal überarbeitet. Die Implementierung der zusätzlichen Bilanzierungsmethoden wurde dem Fortschritt der Transferierung der Programme in ug4 entsprechend fortgesetzt.

Randbedingungen 2. Art für den oberen Modellrand im Falle des Vorhandenseins einer freien Grundwasseroberfläche wurden implementiert und anhand eines komplexen 3D-Modelles getestet. Das Konzept für die Implementierung einer speziellen Randbedingung 3. Art für die Anbindung von Vorflutern wurde erarbeitet. Es wird derzeit umgesetzt.

Für den Task 6 der Task Force on Groundwater and Transport of Solutes zugrunde liegenden Tracertest im Hard Rock Laboratory Äspö wurde ein Strömungsmodell mit 11 deterministischen und 18 synthetischen Klüften erstellt. Die dazu erforderliche Projektion von Punktdaten als Randbedingungen auf die Modelloberfläche mit Hilfe der inversen Distanzwichtung erwies sich dabei als sehr benutzerfreundlich. Die Defizite in den Bilanzierungsmethoden, die sich bei der Berechnung der Ausflüsse für das Prototype Repository gezeigt hatten, konnten inzwischen beseitigt werden.

Das Kick-off Meeting für Task 9 der Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes in Helsinki wurde besucht, um das Potential von Task 9 als Möglichkeit zur Qualifizierung von r^{3t} auszuloten und ggf. bei der Gestaltung der Task Einfluss zu nehmen. Task 9 ist ausgerichtet auf Sorptionseffekte in variierendem geochemischen Milieu sowie die Charakterisierung der Granitmatrix auf Mikrostrukturebene und erscheint damit als Testfall für den verfolgten Zweck geeignet.

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 Arbeit an den Randbedingungen 3. Art wird abgeschlossen.
- ug4 wird sowohl unter Benutzung der Skriptsprache als auch unter Benutzung des Benutzerinterfaces anhand komplexer Modelle getestet.
- Der gemeinsame Projekt-Abschlussbericht wird fertig gestellt.

Der Abschlussworkshop des Projektes wird am 28. September mit dem Titel "Modeling Storage in Deep Layers" im Rahmen der Konferenz „Conference on Modeling Natural Barriers“ in Bad Wildbad stattfinden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 11062B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3, Wirtsgestein: unabhängig		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2012 bis 31.08.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 die Methode der räumlich gefilterten Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen entwickelt, implementiert und untersucht. Es hat sich herausgestellt, dass diese Methode andere Anwendungen findet als in der Turbulenztheorie. Statt möglichst viele Skalen direkt zu modellieren, kann sie in der Grundwassermodellierung benutzt werden, um die Berechnung von tausenden von Ensemblemitgliedern auf die Berechnung von wenigen Ensemblemitgliedern zu reduzieren. Eine Veröffentlichung hierüber steht kurz vor der Einreichung.

Das neue Mischungsmodell, welches auf die speziellen Bedingungen des Transports im Grundwasser zugeschnitten wurde, ist analysiert und mit bereits bekannten Modellen aus der Turbulenztheorie verglichen worden. Dieses neue Modell bildet das im Vergleich zu turbulenten Strömungen viel langsamere Mischungsverhalten in porösen Medien ab und stellt eine erhebliche Verbesserung gegenüber dem alten Modell dar, wenn man diese mit analytischen Lösungen vergleicht. An einer Veröffentlichung über diese Ergebnisse wird zurzeit noch gearbeitet.

PDF-Methoden wurden erfolgreich in dem Programmpaket r^3t implementiert, um hochdimensionale Transportsimulationen von Schadstoffen in porösen Medien im Eulerbild durchführen zu können.

Damit ist das Arbeitspaket AP4 erfolgreich abgeschlossen und es stehen lediglich die geplanten Veröffentlichungen aus.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden zurzeit abgeschlossen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

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

Suciu, N., L. Schüler, S. Attinger, C. Vamos, P. Knabner (2015): Consistency Issues in PDF methods, *Analele Stiintifice ale Universitatii Ovidius Constanta* (in print)

Suciu, N., L. Schüler, S. Attinger, P. Knabner: Toward a filtered density function approach for groundwater, *Advances in Water Resources* (Einreichung für Juli geplant)

Schüler, L., N. Suciu, S. Attinger: A time dependant mixing model for concentration fluctuations in heterogeneous aquifers, *Advances in Water Resources* (Einreichung für August geplant)

Vortrag:

Schüler, L., N. Suciu, S. Attinger, P. Knabner: Filtered density functions for solutes transported in heterogeneous aquifers, *European Geosciences Union General Assembly 2015 (EGU)*, Vienna. (12.-17.04.2015)

Zuwendungsempfänger: Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberg Anlage 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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3, Wirtsgestein: unabhängig		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2012 bis 31.10.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
Gesamtkosten des Vorhabens: 728.034,00 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

Die Arbeiten in AP2 wurden entsprechend dem im Antrag angegebenen Zeitplan fortgesetzt.

AP3: Umsetzung eines hochskalierbaren gekoppelten DD-Mehrgitterlösers

Bei der Umsetzung eines hochskalierenden Mehrgitterlösers für dichtegetriebene Strömung wurde der entwickelte Mehrgittercode für die Anwendung der Gleichungen der Strömung in porösen Medien getestet. Eine Untersuchung der schwachen Skalierbarkeit des Mehrgitterlösers für ein Validierungsproblem (analog zum bekannten Elderproblem) hat eine sehr gute Skalierung auf bis zu 131072 Prozessorkernen auf dem Parallelrechner Juqueen (FZ Jülich) gezeigt. Dabei zeigte sich der gewählte Ansatz über hierarchisch verteilte Teilgitter und Zusammenfas-

sungen der Probleme auf gröberen Gitterleveln als zielführend. Verwendet wurde dabei als Glätter die unvollständige LU-Zerlegung (ILU) zusammen mit einem LU-Grobgitterlöser. Die Anzahl der benötigten Iterationsschritte ist konstant geblieben.

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

Die Neuimplementierung und Integration des bisher r^3t genannten Transportcodes in das neue d^3f auf Basis von ug4 wurde abgeschlossen und sodann Testrechnungen zur Verifikation der wesentlichen Leistungsmerkmale des bisherigen r^3t -Codes (Transport von Radionukliden im von d^3f via Dichteströmung berechneten Geschwindigkeitsfeld sowie Zerfall und Sorption von Radionukliden) durchgeführt. Bei diesen Tests wurden im Vergleich zu den vom alten Code produzierten Ergebnissen keine relevanten Unterschiede festgestellt. Über diese einfachen Benchmark-Rechnungen hinaus wird zurzeit noch ein komplexeres Beispiel für den Abschlussbericht erarbeitet. Für die Möglichkeiten der Berechnung des Strömungsfeldes wurden vier verschiedene Auswahlmöglichkeiten im neuen Steuerungsskript integriert. Es ist nun möglich zwischen folgenden Arten zu wählen: 'prescribed' gibt ein benutzerdefiniertes (Zeit- und Örtlich variables) Feld als Strömungsfunktion vor, 'pressure-driven' erlaubt die Berechnung eines stationären Feldes abhängig vom berechneten Druckgradienten bei konstanter Dichte, 'haline' berechnet die Darcy-Geschwindigkeit durch Lösen der Gleichungen für dichtegetriebene Strömung und 'thermohaline' berechnet die Darcy-Geschwindigkeit bei zusätzlicher Berücksichtigung der Temperatur. Zusätzlich zum Strömungsproblem kann optional ein Transportproblem gelöst werden, wobei als Geschwindigkeitsfeld das entsprechende Feld aus dem Strömungsproblem verwendet wird. Auf Seiten der Transportspezifikation wurde das Interface mit der GRS abgestimmt und überarbeitet. Testläufe mit einer Zerfallsreihe des Thoriums sind durchgeführt worden. Auf Seiten der Auswertungsmöglichkeiten wurde das Steuerungsskript umfangreich erweitert. Neben der Standardeinstellung, die eine Ausgabe aller berechneten Funktionen sowie des Strömungsfeldes ins VTK-Format erlaubt, sind nun die folgenden Analyse- und Ausgabemöglichkeiten vorgesehen: Ausgabe von Daten/Funktionen ins VTK-Format, Integration von Funktionen/Dichten über das Gebiet oder auf Teilgebieten, Integration von Flüssen über Teilränder und Auswertung von Daten an Punkten. Die dabei verwendeten Funktionen können im Skript direkt angegeben werden und können algebraische Funktionen von den berechneten Größen darstellen. Dies erlaubt eine angepasste Datenausgabe zugeschnitten auf die Bedürfnisse des jeweiligen Testfalls und Interesses.

AP6: Löser für hochdimensionale Probleme

Die Diskretisierung des vom Institut für Geowissenschaften der Universität Jena vorgestellten hochdimensionalen, konvektionsdominanten Modells beruht auf einem Upwind-Verfahren und der Kombinationstechnik für die dünnen Gitter. Diese Diskretisierung wurde implementiert und an ein, in diesem Institut entwickeltes Modul für die Berechnung des stochastischen Geschwindigkeitsfeldes angekoppelt. Als linearer Löser wurde das geometrische Mehrgitterverfahren verwendet. Die numerischen Ergebnisse der Testrechnungen wurden mit analytischen Lösungen verglichen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Aufstockungsantrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Die bisher publizierten Berichte und Veröffentlichungen wurden im Halbjahresbericht 2014 (2. Halbjahr) aufgeführt.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2012 bis 30.11.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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: Recherche zur Betrachtung von Redoxprozessen ergab, dass eine Verbesserung der Datenlage (Umgang wie Qualität) zum Deckgebirge Gorleben notwendig ist. Ermittlung eines Löslichkeitsprodukts für einen generischen Gibbsite aus den Felddaten und Erstellung eines Excel-Spreadsheets für die Ermittlung der Al-Konzentration.
- AP3: Abschluss der Säulenexperimente mit Orthoklas, Muskovit, Quarz, synthetisches Sediment. Erhebung von Protolysekonstanten für Orthoklas, Muskovit und Quarz auf der Basis neuer Titrationskurven.
Abschluss aller Analysen zur Erstellung einer Messroutine für die Al-Analytik und erste Batchvorversuche mit Ni und Al.
- AP5: Festlegung der zu berücksichtigenden Szenarien auf Basis der Berichte zur geologischen Langzeitprognose und des FEP Katalogs zur Vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG).
- AP7: Durchführung eines Projekttreffens mit dem Verbundpartner HZDR in Braunschweig.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Abschluss und Dokumentation von Modellrechnungen zu den in AP1 ausgewählten Testfällen.
- AP2: Erweiterung des konzeptionelles Modells: Fertigstellung des Excel-Spreadsheets zur Behandlung von pH und Al-Konzentration für den Fall, dass kein Calcit im System vorhanden ist. Implementierung des weiterentwickelten Konzepts in das Transportprogramm r^3t .
- AP3: Abschluss der Säulenexperimente mit natürlichem Gorleben Sediment sowie Beendigung der Laborexperimente.
Reaktive Transportmodellierung von Eu(III) in Reinmineralphasen sowie synthetischem Sediment.
Batchversuche mit Ni unter verschiedenen geochemischen Bedingungen (Sulfat, Ionenstärke). Batchvorversuche mit Ca und Al.
- AP6: Beginn der Erstellung des Modellgebiets für die Anwendungsrechnungen zum Deckgebirge Gorleben.
- AP7: Durchführung weiterer Projekttreffen mit dem Verbundpartner HZDR und Informationsaustausch mit der BGR.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Flügge, J., Stockmann, M., Brendler, V., Noseck, U.: The smart K_d concept in a practical test – Comparisons of transport simulations with r^3t and PHAST, IAH, 2015

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2012 bis 30.11.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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:

- Revision der Löslichkeitsprodukte von Orthoklas und Muskovit auf Basis aktueller Veröffentlichungen, Festlegung realistischer Löslichkeitsreaktionen
- Update der SCM-Datenbasis
- Erweiterung der Datenbasis bezüglich Fe und Mn
- Recherche zur Betrachtung von Redoxprozessen ergab völlig unbefriedigende Datenlage (Umgang wie Qualität) zum Deckgebirge Gorleben
- Ausreißertests für bessere Abschätzung der Parametergrenzen in K_d -Berechnung

AP3:

- Weitere Experimente zur Np-Sorption an Muskovit und Orthoklas bei höheren pH-Werten
- Auswertung der mit TRLFS bestimmten Oberflächenkomplexen von U(VI) an Orthoklas

AP4:

- Modellierungen für die Bestimmung von SCM-Parametern der Uran(VI)-Sorption an Orthoklas
- Einarbeitung in Beschreibung des Ionenaustausches in PHREEQC

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2:

- Datenbewertung und Erstellung einer Datenbasis der Eu-Festphasen
- Update der Datenbasis WEIMAR.dat für PHREEQC-Rechnungen

AP3:

- Laborexperimente sind abgeschlossen

AP4:

- Bestimmung von SCM-Parametern für die U(VI)-Sorption an Orthoklas und Muskovit
- Fertigstellung des PHREEQC-Inputfiles zur K_d -Berechnung mit Implementierung Ionenaustausch

5. Berichte, Veröffentlichungen

Flügge, J., Stockmann, M., Brendler, V., Noseck, U.: The smart K_d concept in a practical test – Comparisons of transport simulations with r^3t and PHAST, IAH, 2015

Richter, C.: Influence of calcium onto the sorption of uranium(VI) in the far-field of nuclear waste repositories. Vortrag zur Petrus PhD Conference 2015 - Programme for Education, Training and Research on Underground Storage, 22.-26. Juni 2015, Nancy, Frankreich

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3, Wirtsgestein: Salz			
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2012 bis 31.07.2015		Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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:

Im Berichtszeitraum wurde weiter an der Validierung der numerischen Ergebnisse und der Anpassung der in den Polyedermodellen verwendeten Stoffgesetzparameter gearbeitet. Ziel ist die Kalibrierung und Anpassung des Verformungsverhaltens und der Bruchprozesse kleinräumiger Polyedermodelle an Messkurven aus Laborversuchen. Die dazu durchgeführte Sensitivitätsanalyse und Parameteranpassung mit einem alternativen und für diese Aufgabe spezialisierten Rechen-code wurde erfolgreich abgeschlossen und es konnte ein guter Abgleich hergestellt werden. Eine geeignete Parameterkombination wurde zur Weiterverwendung in 3DEC generiert und es wurden entsprechende Laborversuche auch mit 3DEC nachgerechnet. Insgesamt konnte gegenüber der ersten Phase von VerA eine deutliche Optimierung hinsichtlich des Verformungsverhaltens und der Bruchprozesse hergestellt werden.

AP3.1 / AP3.2:

Ziel dieses Arbeitspaketes ist die Generierung von Rissbildern einer Auflockerungszone und darauf aufbauend die Bestimmung relevanter hydraulischer Eigenschaften in der Form eines Permeabilitätstensors. Der Permeabilitätstensor ist für die Erstellung eines großräumigen Kontinuumsmodells zur Abbildung hydraulischer Strömungsprozesse wesentlich. Für die Generierung der Rissysteme wurde zunächst ein mechanisches Kontinuumsmodell einer Streckenkontur erstellt, Spannungsinformationen aus diesem abgeleitet und auf eine kleinräumige Polyederteststruktur übertragen. Nach anfänglichen numerischen Stabilitätsproblemen wurde das Testmodell in ein sog. Fernfeld eingeschlossen und es konnte auf diese Weise ein realistisches Rissystem erzeugt werden. Das Rissystem wurde mit dem bereits erarbeiteten methodischen Ansatz zur Ermittlung eines Permeabilitätstensors durchströmt und es konnte ein symmetrischer, positiv definiten Tensor zweiter Stufe ermittelt werden. Damit ist eine Übertragung der hydraulischen Eigenschaften aus den kleinräumigen Polyedermodellen auf ein Kontinuumsmodell zulässig. Zum Ende des Berichtszeitraums wurde damit begonnen, für verschiedene Tiefen einer Streckenkontur bzw. Auflockerungszone Rissysteme zu erstellen und für diese den Permeabilitätstensor zu bestimmen. Die so ermittelten Parameter sind essentiell für eine großräumige Modellierung des Injektionsprozesses mit Wasserglas und geben wichtige Hinweise auf die Ausbreitung des Injektionsmittels in der Auflockerungszone.

AP6:

Mit der Erstellung des Abschlussberichtes wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP3.1 / AP3.2:

Finalisierung und Auswertung der numerischen Berechnungen.

AP6:

Finalisierung des Abschlussberichtes.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 30.09.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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:

Auf Basis der Optimierung des Salzbindergehaltes auf 15 Massen-% der Gesamtmasse im letzten Bearbeitungszeitraum, konnte im Zuge weiterer Untersuchungen dem optimierten Salzgruskorngemisch ein zusätzlicher Feinkornanteil ($< 0,4$ mm) zur Verbesserung der hydraulischen Eigenschaften sowie zur Erhöhung der Versatzfestigkeit hinzugegeben werden, ohne die Mischbarkeit negativ zu beeinflussen. Durch Verdichtbarkeitsversuche wurde ein optimaler Anteil der Feinsalzanteile von 20 Massen-% im Versatzmaterial bestimmt.

Es wurde ebenfalls die Verdichtbarkeit der GESAV-Sieblinie mit dem Feinsalzanteil im Vergleich zur DEBORA-Sieblinie untersucht. Als Ergebnis stellt sich heraus, dass der Versatzwiderstand der GESAV-Sieblinie mit 20 Massen-% Feinsalzanteil früher ansteigt als im Vergleich zur DEBORA-Sieblinie.

Spaltzugversuche an Probekörpern zeigten, dass mit zunehmendem Probenalter die Spaltzugfestigkeit zunimmt. Die Festigkeitszunahme wird auch durch die spezifische Oberfläche beeinflusst.

AP3:

Zur Permeabilitäts-Porositätsbeziehung von Probekörpern mit dem neuen Salzgrusgemisch wurden erste Ergebnisse ermittelt. Durch die Zugabe des Feinsalzes ist die Permeabilität des Versatzmaterials deutlich gesenkt worden. Der gefügestabilisierte Salzgrusversatz weist auch weiterhin eine für klassischen Salzgrus typische Permeabilitäts-Porositätsbeziehung auf.

Die Festigkeit des Salzgrusversatzmaterials wurde durch die Zugabe des Feinsalzes positiv beeinflusst. Die Festigkeit kann als Anstieg der Kohäsion nachgewiesen werden. Diese stieg durch die Feinsalzzugabe deutlich an.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

Vertiefung der Untersuchungen hinsichtlich der optimalen Verarbeitung mit dem Schwerpunkt der Mischungszubereitung in situ.

AP3:

Durchführung von Kriechversuchen mit Probekörpern verschiedener Einbaudichten und Bindemittelgehalte. Voruntersuchung zum Materialverhalten in situ.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Präsentation des Forschungsvorhabens zur internationalen Konferenz der „Society of Mining Engineers“ am 17.02.2015 in Denver/Colorado (USA)

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11102
Vorhabensbezeichnung: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2, Wirtsgestein: unabhängig	
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2012 bis 31.03.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.216.103,00 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 RWMC-Sitzung, dem Treffen der NEA Initiative „Preservation of Records, Knowledge and Memory (RK&M)“ und dem NEA 2015 IGSC Scenario Development Workshop mit dem Beitrag „Scenario development: The German strategy“ und am NAWG Workshop mit den Beiträgen „Current natural analogue activities in Germany“ und „Natural Analogue Study Ruprechtov: an experience report“.
- Mitarbeit bei den Aktivitäten der IGSC: Leitung der Arbeitsgruppe Safety Case Communication mit Organisation von Arbeitstreffen und Anfertigung eines Zwischenberichts. Vorbereitung der Topical Session „Role of geoscientific arguments in the siting process“.
- Weiterführung der Arbeiten zu einem gemeinsamen FEP-Katalog (inkl. Implementierung einer FEP-Datenbank und Konzeption eines Berichtes zu sicherheitsrelevanten Unterschieden zwischen

Salz in steiler und Salz in flacher Lagerung) und zum Salt Knowledge Archive mit SANDIA. Vorstellung auf dem Treffen des Salt Club am 26.2. bei der NEA in Paris.

- 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.
- Teilnahme am Abschlussworkshop des BMWi-Verbundvorhabens „Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen“ in Mainz.
- Vorbereitung des Workshops on Handling of Uncertainty der TSWG JA8 in London.
- Erarbeitung eines Synthesekapitels zum Statusbericht mit den Projektpartnern zu Gemeinsamkeiten und Unterschieden in der Behandlung von C-14 in Langzeitsicherheitsanalysen.
- Auswertung der für die Abschätzung des Ausmaßes mikrobieller Prozesse in einem Endlager in Ton notwendigen Parameter und der Wechselwirkung der Prozesse untereinander.

TA2:

- Der Einsatz einer auf der Task Force EBS vorgestellten Methode zur Messung von Bentonit-Adsorptionsisothermen könnte Ergebnisse untermauern (s. Vorhaben BIGBEN). Teilnahme am Topical Workshop der SKB über Bohrlochverschlüsse von Sondierungsbohrungen.
- Für die Aufsättigungsversuche mit behinderter Wasserzufuhr wurden Glassinterplatten als Alternative zu dem hydraulisch zu dichten Granit untersucht. Permeabilitätsmessungen mit Wasser lassen Sinterplatten mit der kleinsten Porengröße geeignet erscheinen. Die zwei verbleibenden, langlaufenden nicht-isothermen Tests in ursprünglicher Zellenkonstruktion wurden beendet und bestätigen eine Leckage. Beginn neuer Tests im verbesserten Zellendesign.

4. Geplante Weiterarbeiten

TA1:

- Teilnahme an der IGSC-Sitzung mit Leitung der Topical Session und Weiterführung der Arbeiten zur Arbeitsgruppe Safety Case Communication. - Teilnahme an dem nächsten Treffen der NEA Initiative „Preservation of Records, Knowledge and Memory (RK&M)“ und Mitarbeit in der Arbeitsgruppe „Key information file“. Teilnahme an der General Assembly von CAST und am Projektabschlussstreifen Modaria. Teilnahme am Workshop on Handling of Uncertainty der TSWG JA8 in London.
- Weiterführung der Arbeiten zu einem gemeinsamen FEP-Katalog (u. a. Entwicklung eines Online-Zugriffs auf die FEP-Datenbank) und zum Salt Knowledge Archive mit SANDIA.
- Bearbeitung und Fertigstellung des Kapitels zu Eisen für „High ionic-strength solutions: NEA State of the art report to assess modelling and experimental approaches.“
- Abstimmung der weiteren gemeinsamen Arbeit mit NAGRA zu Radionuklidinventaren in CSD-V Abfällen. Teilnahme an der 91. Sitzung des Arbeitskreises HAW-Produkte.
- Auswertung der Machbarkeit einer empirischen Abschätzung des Ausmaßes mikrobieller Prozesse in einem Endlager.

TA2:

- Teilnahme am Workshop der Task Force EBS in Lausanne. Fortsetzung der beiden Versuchsreihen zur Bentonitaufsättigung. Für eine mögliche Rekalibrierung des Strömungsmodells der BRIE-site (Task 8f): Rückrechnung der Zuflussmengen aus der Matrix in den Bentonit aus den post-test-Daten für BRIE
- Weiterführung der Zusammenstellung und Bewertung von Analoga-Studien in Ton.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
Gesamtkosten des Vorhabens: 443.525,00 EUR	Projektleiter: Dr. Moog	

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

Die Projektplanung wurde nach dem Wechsel der Projektleitung einer Revision unterzogen. Sowohl bezogen auf die zu bearbeitenden Fragestellungen als auch auf die zeitliche Abfolge wurden die Arbeitspakete mit dem zum Teil parallel bearbeiteten Projekt LAVA-2 (Förderkennzeichen 02 E 11324) abgestimmt. Zudem wurde ein regelmäßiger Informationsaustausch mit der TU Bergakademie Freiberg initiiert, um eine mögliche doppelte Bearbeitung von Fragestellungen zu vermeiden. Für die Charakterisierung der Baustoffproben (spez. Oberfläche, Porosität, Phasenanalytik) wird nunmehr mit dem Institut für Baustoffe, Massivbau und Brandschutz (iBMB) in Braunschweig zusammen gearbeitet. Es wurde eine revidierte Projektplanung und Zeitplanung erstellt.

AP1:

Die Versuchsanweisung für die Durchführung von Kaskadenauslaugversuchen wird derzeit überprüft. Es haben Vorversuche zur Ermittlung der einzuhaltenden Äquilibrierungszeit begonnen. Zur Absicherung der laufenden Diffusionsversuche („In-Diffusion“) wird ein weiteres Verfahren aufgebaut. Hierfür wurden neue Messzellen in Auftrag gegeben, bei denen nach dem Prinzip des „Through-Diffusion“ gearbeitet wird.

Bei allen Versuchen, bei denen der Sorelbeton feucht ist bzw. mit wässriger Lösung in Kontakt steht, wird auf einen Ausschluss von CO₂ geachtet, da röntgendiffraktometrische Messungen belegen, dass eine schnelle Carbonatisierung von feuchtem Sorelbeton in normaler Raumluft erfolgt.

Es wurde eine Verfahrensanweisung zur Beprobung von zylindrischen Prüfkörpern aus den In-Diffusion-Versuchen erarbeitet. Ergänzend soll dieses Verfahren nach Möglichkeit auch für die Auswertung der Advektionsversuche Anwendung finden.

Es wurden Zellen in Auftrag gegeben, mit denen unter CO₂-Ausschluss Sorelbetonproben hergestellt werden sollen. Hierzu wird in Absprache mit der TU Bergakademie Freiberg Mg-Oxid definierter Reaktivität eingesetzt werden. Die Aushärtung wird in Wärmeschranken erfolgen, durch die ein bestimmtes Wärmeprofil erzeugt wird. Dadurch wird gewährleistet sein, dass die erstellten Prüfkörper ein definiertes Abbinderegime durchlaufen haben, was ihre Zuordnung zu bestimmten Orten in einem realen Abschlussbauwerk sowie einen Vergleich mit in der TU Bergakademie Freiberg untersuchten Proben ermöglicht.

Advektionsversuche zur Durchströmung intakter Sorelbetonprüfkörper mit NaCl- und IP21-Lösung werden aktuell durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Durchführung der Vorversuche, um die Eignung der neuen Through-Diffusion Messzellen zu belegen. Dabei werden drei Probendicken (1, 2 und 3 cm) getestet.
- Fortführung der Vorversuche für die Kaskadenauslaugung zur Feststellung der Äquilibrierungszeit.
- Vorversuch zur Beprobung zylindrischer Prüfkörper unter besonderer Berücksichtigung der Tracer-Analyse.
- Herstellung von Prüfkörpern für die Untersuchung der Korrosion auf der Kontaktfläche Sorelbeton/Steinsalz. Aufgrund größerer Probenabmessungen müssen hierfür neue Advektionszellen hergestellt werden.
- Durchführung eines einfachen Testlaufs zum 1D reaktiven Stofftransport mit OGS / GEMS. Da es für GEMS keine Datenbasis zur Berechnung chemischer Gleichgewichte in hochsalinaren Lösungen gibt, ist zurzeit nicht klar, ob die Transportrechnungen tatsächlich mit dieser Programmkopplung erfolgen können. Es werden daher zwei Wege verfolgt. Zum einen wird ausgelotet, wie aufwändig ein Export der THEREDA-Datenbasis in ein GEMS-kompatibles Format wäre; zum anderen werden Benchmarkrechnungen mit dem Programm MIN3P durchgeführt, dessen Datenbasisformat sehr einfach zu sein scheint.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11132
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3, Wirtsgestein: Salz	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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 1. Halbjahr 2015 wurden triaxiale Kriechversuche an 4 Proben parallel durchgeführt, bei denen neben der aufgeprägten Beanspruchung die axiale Deformation, die Temperatur sowie die Gasdurchlässigkeit gemessen werden. Die verwendeten Prüfkörper wurden aus Proben gewonnen, die zuvor bei einem triaxialen Druckfestigkeitsversuch im 2. Halbjahr 2014 geschädigt worden waren. Diese Proben weisen im Gegensatz zu den im Autoklaven beprobten ungeschädigten Proben eine erhöhte Gaspermeabilität auf. Die Gaspermeabilität ist in einem Bereich, der spätere Messungen der Laugenpermeabilität bei verschiedenen Minimalspannungen erfolgversprechend scheinen lässt.

Im Anschluss an eine kurze Rekompaktionsphase folgten zunächst eine erste deviatorische Laststufe mit 8 MPa über 56 Tage und anschließend eine zweite Laststufe mit 16 MPa deviatorischer Spannung über 47 Tage. Für diese beiden Laststufen konnte, im Gegensatz zu den Auswertungen des UCc-Versuches aus 2014 an ungeschädigtem Salzbeton, keine eindeutige Trennung zwischen transientem und stationärem Kriechverhalten erfolgen. Erst in der dritten deviatorischen Laststufe mit 36 MPa konnte nach 23 Tagen erstmals ein Kriechbruchverhalten aufgezeichnet werden.

Die modelltheoretische Analyse mit den in 2014 abgeleiteten 2 unterschiedlichen Parameterdatensätzen lieferte keine zufriedenstellende Übereinstimmung mit den Messwerten. Vielmehr mussten die verwendeten Materialparameter soweit angepasst werden, dass für die ersten beiden Laststufen ein modifizierter Parameterdatensatz verwendet wurde, der jetzt auch für die dritte Laststufe ein schädigungsinduziertes beschleunigtes Kriechverhalten simuliert.

Für die Fortführung der experimentellen Untersuchungen mit Messung von Fluidpermeabilitäten an Salzbeton werden derzeit Prognoseberechnungen durchgeführt und ausgewertet. Auf dieser Grundlage wird dann über den Ablauf und die Randbedingung weiterer Versuche entschieden. Es ist beabsichtigt, den Untersuchungen an Salzbeton jeweils einen exemplarischen Versuch mit einer Sorelbetonprobe gegenüberzustellen.

4. Geplante Weiterarbeiten

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Czaikowski, O.; Jantschik, K.; Wieczorek, K.: Modelling the long-term deformation behaviour of concrete based sealing materials in rock salt related to the DOPAS project. CODE_BRIGHT Workshop, 21. May 2015, UPC, Barcelona, Spain.

Jantschik, K.; Czaikowski, O.; Leo Vargas, R.: Time dependent deformation behaviour of salt concrete – Laboratory investigations and modelling activities related to the DOPAS Project. 13th Conference on Creep and Fracture Engineering Materials and Structures (CREEP 2015), 31.05 – 04.06.2015, Toulouse, France.

Hörbrand, T.; Jantschik, K.; Czaikowski, O.: Sealing of a former salt mine – investigating viscous behaviour of salt concrete in the context of the DOPAS project. LUCOEX end conference, 2. – 4. June 2015, Oskarshamn, Schweden.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11142
Vorhabensbezeichnung: Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3, Wirtsgestein: Salz + Ton	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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. Arbeitstreffen in Rauma im Februar zur Diskussion der Ergebnisse und zur Erstellung eines entsprechenden Berichts.
- AP3: Erstellung eines ersten Strukturmodells zur Durchführung zukünftiger integrierter Rechnungen auf Basis des Endlager- und Verschlusskonzeptes der VSG. Durchführung erster Testrechnungen mit dem existierenden LOPOS Segmentmodell und Vergleich der Ergebnisse mit den bereits durchgeführten deterministischen Rechnungen ohne den Einsatz von LOPOS.
- AP4: Teilnahme am DOPAS Management Team Meeting 01.06.2015 in Stockholm. Organisation des WP5 in DOPAS als Arbeitspaketleiter. Entwurf von Inhalten für zwei Unterrichtseinheiten für den einwöchigen DOPAS Trainingskurs im September in Prag.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weitere Mitarbeit bei den unter „Durchgeführte Arbeiten“ genannten Arbeiten im AP2 von DOPAS zur Design-Basis.
- 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: Implementierung der zu berücksichtigenden Prozesse in ein Segmentmodell von LOPOS. Durchführung von deterministischen und probabilistischen Rechnungen mit LOPOS unter Verwendung des neu entwickelten Segmentmodells. Vergleich der Ergebnisse mit den bereits durchgeführten deterministischen Rechnungen ohne den Einsatz von LOPOS. Beginn der Erstellung des Berichts zur Dokumentation der von der GRS durchgeführten Arbeiten (Deliverable D5.8).
- AP4: Organisation des WP5 in DOPAS als Arbeitspaketleiter. Durchführung eines WP5 Arbeitstreffens am 29.09.2015. Beginn der Erstellung des WP5-Abschlussbericht zur Integration der Arbeiten aller Projektpartner in WP5 von DOPA (Deliverable 5.10). Erstellung von Unterlagen für und Durchführung von zwei Unterrichtseinheiten für den DOPAS Trainingskurs vom 15.09. bis 18.09.2015 in Prag.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik, Feld 3.3, Wirtsgestein: Salz + Ton	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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. Bei den Verfahren handelt es sich um die Rüttelverdichtung und die Impulsverdichtung. Bei beiden Verfahren handelt es sich um Methoden, bei denen das Material in kurzer Zeit verdichtet wird. Rheologisches Materialverhalten wie beispielsweise Kriechen kommt dabei nicht zum Tragen.

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 wird 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 wurden die Arbeiten zur Entwicklung eines Partikelmodells, das in der Lage ist, eine impulsartige Verdichtung zu simulieren, fortgeführt. Das Prinzip der Impulsverdichtung 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, Impuls-geschwindigkeit, Schlagfrequenz, Anzahl der Impulse und den Materialeigenschaften der zu verdichtenden Probe.

Der erste Teil der Arbeiten bestand darin, geeignete Kornformen für die Simulation zu erzeugen. Zu diesem Zweck wurden Dünnschliffe von Proben analysiert, die im Rahmen von Verdichtungsversuchen im Labor erzeugt wurden. Anhand dieser Dünnschliffaufnahmen wurden typische Kornformen verschieden großer Salzkristalle selektiert. Diese Kornformen wurden anschließend mittels fest verbundener Partikelkonfigurationen für die Simulation modellmäßig erfasst.

Der zweite Teil der Arbeiten bestand in der Erzeugung eines geeigneten Mischungsverhältnisses der Körner. Auch hier wurde auf das Probenmaterial aus dem Labor zurückgegriffen. Die Laborproben für die Verdichtungsversuche wurden mit einer Mischung aus verschiedenen Kornbändern (Größenverteilungen) hergestellt. Sowohl die einzelnen Kornbänder, als auch die Mischungsverhältnisse wurden im Modell nachgebildet.

Mit Testrechnungen zur Simulation der schlagenden Verdichtung und zur Prüfung der Plausibilität der Ergebnisse wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung der Modellierungsarbeiten zur Simulation einer schlagenden Verdichtung und Durchführung einer Kalibrierung des Modells anhand von entsprechenden Verdichtungsversuchen im Labor.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2, Wirtsgestein: Ton	
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 31.01.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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 4 Treffen mit den nationalen Projektpartnern und 2 Treffen mit den russischen Projektpartnern stattgefunden.

- AP1: Planung und Diskussion der möglichen Anknüpfungspunkte der durchzuführenden Arbeiten mit den russischen Projektpartnern während des einwöchigen Besuchs vom 20. bis 24. April der Arbeitsgruppe Rumynin.
- AP2: Diskussion der vorliegenden Informationen zur geologischen Situation am Standort Sosnovy Bor. Kommentierung eines ersten Berichtsentwurfs der BGR zur geologischen Situation.
- AP5: Diskussion der zu verwendenden Modelle und Eingangsdaten mit den russischen Projektpartnern.
Beginn der Zusammenstellung von Eingangsdaten für die Verwendung in den langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen zur Radionuklidenausbreitung CLAYPOS, POSA und BIOTrend. Bei nicht zur Verfügung stehenden Daten zum Aktivitätsinventar und den Transportparametern wurde damit begonnen, einen Vergleich mit international verfügbaren Daten durchzuführen und Referenzwerte für die Daten abzuleiten.

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 .
Abschluss der Zusammenstellung der Eingangsdaten für die sicherheitsanalytischen Rechenprogramme CLAYPOS, POSA und BIOTrend und Beginn erster Rechnungen zur Radionuklidenausbreitung.
Festlegung von Bandbreiten der Eingangsdaten für die sicherheitsanalytischen Rechenprogramme zur Durchführung probabilistischer Analysen.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 31.01.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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

Ungeachtet der Tatsache, dass die Arbeiten des russischen Partners gegenwärtig ruhen, konnte BGR auf Grundlage der ihr zur Verfügung stehenden Informationen eine erste Beschreibung der lokalen geologischen Gesamtsituation vorlegen. Sie stellt grundsätzlich eine gute Grundlage für die Fortführung des Vorhabens dar. Der Bericht beschreibt im Detail den bisherigen Kenntnisstand über die geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse in dem Bereich der Vendischen Tone und enthält eine Zusammenfassung bisher vorliegender Ergebnisse aus Laborversuchen an Gesteinsproben.

In der Woche vom 20.-24.04.2015 konnte ferner ein Informationsaustausch mit Russischen Kollegen des "Institute of Environmental Geology Saint Petersburg State University" arrangiert werden. Der Informationsaustausch erfolgte im Rahmen von Arbeitstreffen bei der BGR in Hannover, der GRS in Braunschweig und der DBE TECHNOLOGY GmbH in Peine. Auf diesen Treffen wurden jeweils aktuelle Arbeiten der Gesprächspartner vorgestellt und diskutiert.

Im Berichtszeitraum wurde damit begonnen zu untersuchen, welche standortspezifischen Belastungen bei der Auffahrung, dem Ausbau der untertägigen Strecken und dem Einbau von Dichtelementen zu beachten sind. Zu diesem Zweck wurde ein numerisches Modell entwickelt, das in der Lage ist, die Auffahrung einer Strecke in der betrachteten Tonformation ebenso zu simulieren, wie das Setzen von einzelnen Ausbauschalen, Widerlagern und Dichtelementen. Mit dem erstellten numerischen Modell wurden erste Berechnungen mit verschiedenen Materialparametern durchgeführt. Die Plausibilität der Modellergebnisse konnte gezeigt werden. Mit der Analyse der Ergebnisse wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Überprüfung des geologischen Modells das seitens BGR entwickelt wird, im Hinblick auf eine geometrische Vereinfachung als Schnittstelle für numerische Modelle.

Durchführung von Modellierungen zur Analyse des mechanischen Systems im Bereich zu errichtender Abdichtbauwerke.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2013 bis 31.12.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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: Untersuchungen zur Entwicklung einer neuen Gussasphaltrezeptur. Der praktische Bindemittelanteil muss noch erhöht werden.

AP4: Der halbtechnische Versuch HTV-4 zum Test eines Bentonitdichtsystems mit Äquipotentialsegmenten wurde beendet. Der Rückbau und die endgültige Auswertung bestätigten die Funktionstüchtigkeit dieses Systems auch bei schneller Flüssigkeitsdruckbelastungsgeschwindigkeit.

Mit einer Bitumendichtung nach dem Prinzip "Harte Schale-Weicher Kern" wurde ein weiterer Bohrlochversuch (BIT-utB-02) sowie ein Bohrlochversuch mit einer Bitumenverfüllten Schottersäule (Asp-utB-01) eingebaut und getestet. Alle bisherigen drei Bohrlochversuche sind praktisch gasdicht ($k < 10^{-19} \text{ m}^2$).

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Endfassung Bericht.

AP2: Arbeiten abgeschlossen.

AP3: Beginn des Teilberichtes.

AP4: Versuch zur dynamischen Impulsverdichtung von Salzgrus-Ton-Gemisch in einem Gesenk mit 8,5 m³ Volumen (neuer Termin KW 29-30).

Einbau des In-situ-Bohrlochversuches Asp-utB-02 (Test der neuen Gussasphaltrezeptur).

In-situ-Permeabilitätsmessungen im MgO-Beton und in der Kontaktzone zum Steinsalz und nachfolgender selektiver Rückbau des Großbohrlochversuches mit MgO-Beton C3.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2013 bis 31.12.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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

Zusammen mit der TU Freiberg wurde eine Berichtsstruktur vereinbart. Es sollen je ein Teilbericht für die Verschlusskonzepte (AP1), die Laborversuche (AP3), die Halbtechnischen Versuche (AP4) und die Modellierung (AP5) in deutscher Sprache erstellt werden. Ein zusätzlicher Synthesebericht fasst alle Ergebnisse in Englisch zusammen.

Die Konzeptentwicklung der Verschlussysteme für Tongestein wurde durch eine vereinfachte Vorbemessung ergänzt und weitgehend abgeschlossen (AP1). Der Teilbericht wurde zusammen mit dem Entwurf der TU Bergakademie Freiberg bzgl. Schachtverschlusskonzepten in Salzgestein zu einem ersten kompletten Berichtsentswurf zusammengeführt.

Mit Hilfe von numerischen Modellierungen soll die Setzung einer Schottergesteinssäule unter dynamischer Belastung eines Erdbebens prognostiziert werden, um die Möglichkeit eines rechnerischen Sicherheitsnachweises abzuleiten. Im Berichtszeitraum wurden Schottersäulen unter Verwendung des bereits entwickelten Partikelmodells generiert. Als Eingangsparameter dienen die aus der Sensitivitätsanalyse abgeleiteten "Best Design"-Werte. Um das mechanische Verformungsverhalten der Schottersäule auf seine Richtigkeit hin überprüfen zu können, wurde für verschieden dimensionierte Schottersäulen die Spannung am Boden ausgewertet. Üblicherweise werden die Spannungen ab einer bestimmten Schotterfüllhöhe nicht weiter erhöht, da sich das Schüttgut über die Reibung an der Bohrlochwand abstützt (Siloeffekt). Hinsichtlich dieses Verhaltens ist das numerische Modell weiter zu optimieren.

Des Weiteren wurden erste Testmodelle mit einer vereinfachten Schottersäule erstellt und es wurde das Ausbreitungsverhalten von Erdbebenwellen unter Anwendung entsprechender dynamischer Randbedingungen untersucht.

Die Kalibrierung des Bitumens am Schermodell wurde abgeschlossen. Die Simulationen zeigen, dass das verwendete rheologische Modell geeignet ist, das Materialverhalten abzubilden. Eine Verbesserung der Simulation kann durch zusätzliche Versuche und die Erweiterung des Modells um die Strukturviskosität erfolgen. Zur Beurteilung der thermischen Einwirkungen des Heißeinbaus von Bitumen und Asphalt auf das Tongebirge wurde ein numerisches Modell erstellt. Mit dem Modell konnte zunächst die Ausdehnung der Auflockerungszone um den Schacht nachvollzogen werden. Durch den simulierten Einbau heißen Bitumens über eine definierte Mächtigkeit konnte gezeigt werden, dass keine zusätzliche Schädigung über die Auflockerungszone hinaus zu erwarten ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterentwicklung und Dokumentation der modularen Schachtverschlusskonzepte.

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Matthias Gruner, Wolfram Kudla, Philipp Herold, Michael Jobmann (2015): Schachtverschlusskonzepte für zukünftige Endlager für hochradioaktive Abfälle für die Wirtsgesteinsoptionen Steinsalz und Ton, Mining Report 151 (2015) No. 1, Essen.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1, Wirtsgestein: Kristallin	
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2013 bis 29.02.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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: Vergleich der Ergebnisse der Vorhersagerechnungen für CFM RUN 13-05 mit den experimentellen Daten. Überprüfung der Kurvenverläufe und Wiedererhaltungsraten, Diskussion von Abweichungen und entsprechende Modifikation der Austauschraten von Radionukliden, Kolloiden und Kluftmatrix.
Durchführung von Simulationsrechnungen, Langzeitrechnungen und Vergleich mit den experimentell über Zeiträume von mehr als 100 Tagen bestimmten Spurenkonzentrationen im Tailing von CFM RUN 12-02. Überprüfung von Modellparametern hinsichtlich ihres Einflusses auf die Langzeit-Konzentration von Am-243 und Pu-242 im Tailing der Durchbruchskurve.
Prüfung und Überarbeitung der langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen für ein Endlager in Granit. Diskussion der Modellannahmen und Auswirkungen mit den Modellierern der POSIVA-Studie.
- AP3: Vorstellung von Ergebnissen auf dem CFM-Meeting in Tokio durch die Projektpartner. Erstellung von Teilbeiträgen für Veröffentlichungen in zwei Fachzeitschriften: Vorstellung des Rechenprogramms COFRAME und Anwendungsrechnungen mit den Rechenprogrammen d^3f und r^3t .

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Weiterführung von Rechnungen zum Radionuklidverhalten im Langzeit-Tailing der Durchbruchskurven für CFM RUN 12-02 und CFM RUN 13-05.
Erstellung eines konzeptuellen Modells und Durchführung von 1D- und 2D-Rechnungen zum im Frühjahr 2014 gestarteten integrierten Experiment mit Freisetzung von Kolloiden und Radionukliden aus einer eingebauten, dotierten Bentonitquelle.
Überarbeitung des Berichts zu den langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen für ein Endlager in Granit mit POSIVA. Diskussion des Einflusses der Kolloide auf die Langzeitsicherheit. Veröffentlichung im Rahmen des CFM-Vorhabens.
- AP3: Teilnahme am CFM Modelers Workshop in Santa Fe 2015. Vorstellung der aktuellen Projektergebnisse.
Durchführung eines weiteren Projekttreffens mit dem Verbundpartner KIT-INE.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1, Wirtsgestein: Kristallin		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2013 bis 29.02.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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

AP1: Status: Um den Einfluss der Kluftapertur auf die Erosion von kompaktierten Bentonit zu untersuchen wurde ein Quell/Erosionsversuch unter stagnanten Fließbedingungen mit einer Apertur von 0,1 mm durchgeführt. Erwartungsgemäß entwickelte sich sowohl die Erosionsfront („Gelschicht“) sehr viel langsamer als in bisherigen Experimenten mit einer Apertur von 1 mm. Zudem wurden deutlich höhere Quelldrücke im Bentonitring gemessen, wobei jedoch kein Druckabfall mit Beginn der Quellung in die Apertur hinein beobachtet wurde. Als kritisch erwies sich die Bildung großer Luftblasen im gesamten Aperturvolumen, die wahrscheinlich auf die sehr langsame Wassersättigung des kompaktierten Bentonits zurück zu führen ist.

Des Weiteren wurden in situ elektronenmikroskopische Untersuchungen an Bentonit Aggregaten bei variablen relativen Luftfeuchtigkeiten zwischen 15 % und 95 % durchgeführt. Dabei konnte gezeigt werden, dass sich das Hydratationsverhalten des untersuchten Febex-Bentonit (~15 % nichtquellfähigen Tonmineralen) deutlich von dem anderer Bentonite (z. B. MX80) unterscheidet. Darüber hinaus wurde beobachtet, dass die Quellung der Smectit-Partikel nur entlang der c-Achse verläuft und der Einfluss der Zwischenschichtkationen auf das Quellungsverhalten dieses Bentonits nicht so ausgeprägt ist wie für andere Bentonite publiziert.

Für die geplanten RN-Bentonitkolloid-Reversibilitätsuntersuchungen wurden die Nuklide bereitgestellt und Porenwasser in ausreichender Menge angesetzt. Parallel sind RN-Sorptionsreversibilitätsversuche an Grimsel Kluffüllmaterial gestartet worden, um das Verhalten des Kluffüllmaterials im binären System zu untersuchen und die AMS Langzeitstudien zur Desorptionskinetik im Felslabor mit weiteren Daten zu verifizieren.

Die Arbeiten zum Kolloidtransport in Fließzellen fokussierten sich auf die Untersuchung des Kolloidanlageungsverhaltens an natürlichen Mineralphasen des Grimsel Granodiorits. Experimente mit Fluoreszenz-Latexkolloiden (25 nm und 1000 nm) bei pH 5 als Funktion der Verweilzeit (Stop Flow Bedingungen für lange Verweilzeiten) und Kluftorientierung zeigten eine Abnahme des Wiedererhalts mit steigender Verweilzeit, höherer Rauigkeit (Granit > Plexiglass) sowie einen Einfluss der Gravitation (nur für 1000 nm Partikel) auf die Kolloidanlagerung. Post-mortem Untersuchungen der Granitoberfläche mittels Fluoreszenzmikroskopie und Laser Scanning Mikroskopie bestätigten die Abhängigkeit des Kolloidanlageungsverhaltens von der Mineralrauigkeit und Mineralogie.

API.2: Status: Schwerpunkt der Arbeiten im 1. Halbjahr 2015 lag weiterhin auf der begleitenden Analytik und Interpretation erster Proben des „Long term In-situ-Test (LIT)“.

- 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. Amino-G zeigt weiterhin einen kontinuierlichen Anstieg der Konzentration und somit einen direkten Kontakt der RN-markierten Probenials mit der Scherzone. RN Daten zeigen erste Signale von ⁹⁹Tc.
- Die Auswertung des Radionuklidexperiments Run 13-05 bezüglich der Kolloidmessungen via s-Kurven LIBD sind abgeschlossen. Weitere Proben aus dem Tailing der Durchbruchkurve des Run 13-05 zur Analyse mittels AMS an VERA (Vienna Environmental Research Accelerator) werden zurzeit analysiert.

AP2.4: Status: Die Arbeiten zur numerischen Simulation der Strömungs- und Transportprozesse der oben aufgeführten Fließzellenexperimente wurden fortgeführt. Zusätzlich zu dem bestehenden 3D Model, wurde ein 2D Model in der Mittelachse der Fließzelle erstellt. Erste Ergebnisse des 2D Modells zeigen, unter anderem, deutlich einen Einfluss von Gravitation auf die 1000 nm Partikel in Abhängigkeit der Verweilzeit und validieren die experimentellen Resultate.

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:

Quinto, Golser, Lagos, Plaschke, Schäfer, Steier, Geckeis (2015): “Accelerator Mass Spectrometry of Actinides in Ground- and Seawater: An Innovative Method Allowing for the Simultaneous Analysis of U, Np, Pu, Am, and Cm Isotopes below ppq Levels.” *Anal. Chem.* 87(11), 5766-5773.

Delavernhe, Steudel, Darbha, Schäfer, Schuhmann, Wöll, Geckeis, Emmerich (2015): „Influence of mineralogical and morphological properties on the cation exchange behavior of di-octahedral smectites” *Colloids and Surfaces A* 418, 591-599.

Norrfors, Bouby, Heck, Finck, Marsac, Schäfer, Geckeis, Wold (2015): “Montmorillonite colloids: I. Characterization and stability of dispersions with different size fractions.” *Appl. Clay Sci.* 114, 179-189.

Friedrich, Schild, Weidler, Schäfer (2015, accepted): “Hydration of FEBEX bentonite observed by environmental scanning electron microscopy (ESEM)” CMS lecture series.

Reiche, Noseck, Blechschmidt, Schäfer (2015, in review): „Migration of contaminants in fractured-porous media in the presence of colloids: effects of kinetic interactions” *Porous Media*.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11213
Vorhabensbezeichnung: Qualifizierung der Rechenprogramme d ³ f und r ³ t, Kurztitel Quader	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3, Wirtsgestein: unabhängig	
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2013 bis 29.02.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
Gesamtkosten des Vorhabens: 732.700,00 EUR	Projektleiter: Schneider

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen d³f und r³t 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 d³f und r³t, 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 r³t, 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 r³t
- AP5: Dokumentation
- AP6: Modellerstellung und Fehlerbehebung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Zusammenarbeit mit der TF GWFTS wurde fortgesetzt:
Nachdem die beim Generieren des Rechengitters aufgetretenen Probleme gelöst worden waren, konnte ein Strömungsmodell für das Prototype Repository in der Vorinstallationsphase erstellt werden. Dabei ist die hohe Realitätsnähe bezüglich der berücksichtigten Klüfte im Vergleich zu anderen Modellen insbesondere aus der Task Force EBS hervorzuheben. Grundlage für die hydraulischen Parameter bildete das Strömungsmodell für das kleinerskalige BRIE-Experiment (Buffer Rock Interaction Experiment). Da bei der Kalibrierung der gemessenen Flüsse sowohl entlang der Strecke als auch in den sechs Erhitzebohrlöchern nur moderate Änderungen in den Permeabilitäten vorgenommen werden mussten, kann die Übertragung des Modellkonzepts für das BRIE auf das Prototype Repository als gelungen gelten.
Die diesbezüglichen Ergebnisse wurden auf dem Mini-Symposium „Theoretical and Computational Methods for Problems in Highly Heterogeneous and Fractured Porous Media“ im Rahmen der SIAM-Conference on Mathematical and Computational Issues in the Geosciences vorgetragen.
- AP3: Es wurde damit begonnen, aus den von Sandia übergebenen Daten ein 3D-Modell der WIPP-Site aufzubauen.
- AP4: 2D und 3D Strömungsmodelle für den Testfall Cape Cod wurden mit ug4 gerechnet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- AP1: Extraktion der Temperaturdaten aus dem Wärmemodell für das Prototype Repository als Eingabe für ein thermo-hydraulisches Modell und Erstellung des thermo-hydraulischen Modells zur Bestimmung des Wärmeeinflusses auf die Strömung.
Teilnahme am Meeting der Task Force GWFTS in Kalmar.
- AP3: Das Model der WIPP-Site wird gerechnet.
Präsentation erster Berechnungsergebnisse zur WIPP auf dem Deutsch-Amerikanischen Workshop in Dresden.
- AP4: Durchführung der Rechnungen zum reaktiven Stofftransport für den Testfall Cape Cod; Beginn der Rechnungen zum Testfall aus dem Projekt Weimar.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2013 bis 31.12.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
Gesamtkosten des Vorhabens: 979.523,00 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 geo-mechanischen 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 der EDZ und der Kontaktfuge in Abhängigkeit von der Minimalspannung bei Lösungszufluss wurden radial gelochte Steinsalzprüfkörper verwendet, die im Inneren Salzbetonkerne enthalten. Im 1. Halbjahr wurden zwei Versuche mit in dieser Art kombinierten Prüfkörpern parallel durchgeführt und ausgewertet. Im ersten Versuch wurde ein ungeschädigter Salzbetonprüfkörper verwendet. Der für den zweiten Versuch verwendete Prüfkörper wurde aus Proben gewonnen, die zuvor bei einem triaxialen Druckfestigkeitsversuch im 2. Halbjahr 2014 geschädigt wurden.

Nach Einbau eines radial gelochten Steinsalzprüfkörpers mit Salzbetonfüllung im Autoklav wurde die Gaspermeabilität des Verbundsystems in Abhängigkeit der Minimalspannung als Ausgangswert gemessen. In einem weiteren Schritt wurde dann das verwendete Medium durch eine gesättigte Salzlauge ersetzt und die Lösungspereabilität wiederum in Abhängigkeit der Minimalspannung bestimmt. Der kombinierte Prüfkörper mit dem ungeschädigten Salzbetonkern zeigte im Ausgangszustand bei einer Minimalspannung von 1 MPa eine Laugenpermeabilität im Bereich von 10^{-15} m^2 . Mit steigender Minimalspannung zeichnete sich eine deutliche Abnahme der Permeabilität um mehrere Größenordnungen ab. Bei einer Minimalspannung von 5 MPa wurde der Messbereich von 10^{-20} m^2 unterschritten.

Der kombinierte Prüfkörper mit dem vorgeschädigten Salzbetonkern zeigte eine mit der Minimalspannung um zwei Größenordnungen abnehmende Laugenpermeabilität im Bereich von 10^{-13} m^2 auf 10^{-15} m^2 . Bei einer konstanten Minimalspannung von 5 MPa wurden im (mehr)wöchentlichen Abstand weitere Messungen durchgeführt. Nach einer Dauer von vier Wochen konnte keine weitere Reduzierung der Permeabilität gemessen werden.

Im Rahmen einer zweiten Laststufe wurde die Minimalspannung stufenweise auf einen Wert von 10 MPa erhöht und jeweils die Laugenpermeabilität bestimmt. Unmittelbar mit der Lasterhöhung nahm die Permeabilität auf einen Bereich von 10^{-16} m^2 ab. Bei einer konstanten Minimalspannung von 10 MPa wurden im (mehr)wöchentlichen Abstand weitere Messungen durchgeführt und eine mit der Zeit weiterhin abnehmende Permeabilität bis in den Bereich von 10^{-18} m^2 beobachtet. Es wird derzeit davon ausgegangen, dass dieser Prozess auf das viskose Materialverhalten des Steinsalzes zurückgeführt werden kann. Die Kontaktfuge wird damit geschlossen und die integral über die kombinierte Probe gemessene Laugendurchlässigkeit reduziert.

Im 2. Halbjahr sind neben der Fortführung dieser Versuche auch dazu begleitende modelltheoretische Berechnungen vorgesehen.

4. Geplante Weiterarbeiten

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Czaikowski, O.; Wieczorek, K.; Hertel, U.: Sealing capacity of a seal system in rock salt – Hydraulic impact of the EDZ long-term evolution. American Rock Mechanics Association (ARMA 2015), 28.06 – 01.07.2015, San Francisco, CA, USA.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 31.12.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 jedwedes 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 wurde mit der laborativen Charakterisierung der 5 ausgewählten Injektionsmittel begonnen. Hierbei wurde mit der Erfassung der folgenden Eigenschaften der Fluide begonnen: Dichte, Viskosität, Grenzflächenspannung sowie die Benetzungswinkel der Flüssigkeiten. Zudem wurden mit den ausgewählten Injektionsmitteln Injektionen an einem niedrig permeablen Sandstein durchgeführt. Ziel dieser Injektionen ist es, das Eindringverhalten des Injektionsmittels in die Porenräume des Sandsteins zu erfassen. Die Injektionen wurden bei einem Druck von 20 bar durchgeführt und während der Injektion ließ sich ein Austritt des Injektionsmittels an den Stirnseiten der Sandsteinblöcke beobachten.

Des Weiteren wurden im Berichtszeitraum Salzbohrkerne untertage entnommen sowie Vorversuche zur Herstellung der Kontaktfuge durchgeführt.

Am 12. März fand ein Treffen mit den Projektpartnern statt. Die Ziele dieses Treffens war die Vorstellung und Diskussion der detaillierten Versuchsplanung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Berichtszeitraum sollen die injizierten Sandsteine mittels Hg-Porosimetrie ausgewertet werden sowie die Kontaktfugeninjektion durchgeführt werden.

Zudem erfolgt im kommenden Berichtszeitraum die Verfassung des Abschlussberichts des Vorhabens.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und -technik, Feld 3.2, Wirtsgestein: Salz, Ton, Kristallin	
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 30.09.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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 1.000 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 Rahmen des Arbeitspakets 2 (AP2) wurde die Analyse und Bewertung der Übertragbarkeit der Methoden und Werkzeuge zur PSA für Kernkraftwerke auf eine Schachtförderanlage für schwere Lasten bis 175 t weitergeführt. Die Bearbeitung der AP2 konzentrierte sich auf die drei neuen Berichtsentwürfe, die von der GRS im Rahmen des Projekts "Fortschrittliche Methoden und Werkzeuge für probabilistische Sicherheitsanalysen (FKZ: RS1198)", im Juni 2015 zur Verfügung gestellt wurden.

Im Rahmen des AP3 wurde die Bewertung eines deterministischen Ansatzes zur Störfallanalyse durchgeführt. Hierfür wurde ein möglicher deterministischer Ansatz beschrieben und seine Anwendbarkeit zur Wertung der Sicherheit betrachtet.

Begonnen wurde mit der Analyse der Anforderungen aus der Gesetzgebung für Endlager (z. B. StrlSchV) sowie den Methoden für deterministische Störfallanalysen für andere kerntechnische Anlagen und Schachtförderanlagen. Der §49 Abs. 2 der StrlSchV fordert für Endlager die Durchführung einer Störfallanalyse gemäß dem Stand der Wissenschaft und Technik. Mit Hilfe deterministischer und probabilistischer Verfahren soll die Einhaltung der Grenzwerte nachgewiesen werden. Mit Blick auf die Betriebssicherheit des Endlagers muss eine Sicherheitsanalyse stets für die gesamte Schachtförderanlage durchgeführt werden.

Deterministische Verfahren zur Analyse der Betriebsabläufe erlauben die Identifizierung von Störfällen, bei denen die Schutzziele nicht erreicht werden. Dabei werden abdeckende Szenarien oder Ereignisse zugrunde gelegt. Für die Schachtförderung bildet die Störfallanalyse eine wesentliche Komponente des Gesamtsystems Endlager. Dabei bildet die Schachtförderanlage selbst ein Teilsystem, was wiederum in einzelne Komponenten unterteilt werden kann. Für jedes dieser Teilsysteme kann eine Störfallanalyse durchgeführt werden.

Für die deterministische Überprüfung einer Schachtförderanlage können bekannte Ansätze und Methoden aus Industrie und Technik genutzt werden. Die im Rahmen des AP3 analysierten Methoden sind die Fehlermöglichkeits- und -einflussanalyse (FMEA), die Fehlerbaumanalyse (FTA), die Ereignisbaumanalyse (ETA), die Prognose, Auffinden der Ursache, Abschätzen der Auswirkungen, Gegenmaßnahmen (PAAG) und die vorläufige Sicherheitsanalyse (PHA). Die Auswahl eines Verfahrens ist vom Zweck der Überprüfung (z. B.: Entwicklung oder Genehmigung) abhängig, und die Auswahl einer Methode hängt von der Zielstellung ab. Zusammenfassend wurde im AP3-Bericht ein möglicher deterministischer Ansatz beschrieben und seine Anwendbarkeit zur Wertung der Sicherheit bewertet. Die Hauptaspekte und Schwierigkeiten, die im Rahmen des deterministischen Ansatzes für Schachtförderanlagen berücksichtigt werden müssen, wurden beschrieben und analysiert.

Die Auswertung von internationalen Entwicklungen bei Sicherheitsanalysen zur Schachtfördertechnik wurde im Rahmen des AP4 aufgenommen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im 2. Halbjahr 2015 werden die Bearbeitung des AP4 "Internationale Entwicklungen bei Sicherheitsanalysen zur Schachttransporttechnik" fortgeführt und des AP5 "Maßnahmen zur Restrisikominimierung" aufgenommen. Abschließend erfolgt in AP6 die Aufstellung eines weiterführenden Arbeitsprogrammes.

Die Auswertung der Berichte zu "Fortschrittliche Methoden und Werkzeuge für probabilistische Sicherheitsanalysen" (FKZ: RS1198) wird abgeschlossen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11273
Vorhabensbezeichnung: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Vorprojekt (UMB-V)	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton	
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2013 bis 31.05.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 31.05.2015
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 sollen 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 UMB (FKZ 02 E 11344A) 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 nach ca. 7 Monaten im Januar 2015 beendet. Die Bentonitproben wurden von der Lösung getrennt, getrocknet und dialysiert. Es wurden anschließend je ein Pellet in den Messzellen aus dem Ausgangsmaterial und aus dem bei 60 °C reagierten Material hergestellt und einer zweiwöchigen Quelldruckmessung unterzogen und hinsichtlich ihrer Lösungspermeabilität untersucht. Aufgrund einer krankheitsbedingten Abwesenheit des zuständigen Mitarbeiters konnten im Vorprojekt nur zwei aus den insgesamt neun geplanten Pellets untersucht werden. Die Untersuchung von restlichen Pellets erfolgt im Projekt UMB.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die noch ausstehenden Messungen des Quelldrucks und der Permeabilität des reagierten und nicht-reagierten Bentonits werden durchgeführt.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1, Wirtsgestein: Ton, Kristallin	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2014 bis 30.06.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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 Vorversuche wurden abgeschlossen. Die Zeit, die benötigt wurde, um lufttrockene Proben ins Gleichgewicht mit einer Atmosphäre von 75 % Luftfeuchtigkeit zu bringen, betrug mehr als 60 Tage. Die permanent im Exsikkator gemessene Luftfeuchtigkeit stieg mit dem Sättigungsfortschritt an. Stichprobenartige Messungen des Wassergehalts zeigten jedoch, dass die Luftfeuchtigkeit zwar keinen guten Anhaltspunkt für den exakten Wassergehalt gibt, wohl aber für den Sättigungsfortschritt.

Für den Hauptversuch wurde kleineren Probemengen (100 g) der Vorzug vor größeren Mengen (400 g) gegeben, weil der Genauigkeitsgewinn gering war und ein höherer Wert darin gesehen wurde, eine größere Anzahl an Vergleichsproben zu verwenden. Anschließend wurde der Hauptversuch mit zehn Exsikkatoren mit unterschiedlichen Salzlösungen und je drei Bentonitproben bei 30 °C begonnen. Wegen der langen Aufsättigungszeiten konnte dieser Test nicht im Berichtszeitraum abgeschlossen werden.

Beim Besuch der Clay Conference in Brüssel wurden 2 Poster präsentiert; zum einen über das Konzeptmodell der GRS zur Bentonitaufsättigung, zum anderen über die mathematische Ähnlichkeit des Dampfdiffusionsmodells der GRS mit der Hydraulik der ungesättigten Strömung in den klassischen THM-Modellen. Über letzteres Thema wurde auch ein Artikel eingereicht: Kröhn, K.-P.: Bentonite re-saturation: Different conceptual models – similar mathematical descriptions. FKZ 02 E 11284 (BMW), The Geological Society, Special Issue, (under review)

Auf dem Workshop der Task Force EBS in Barcelona, der im Rahmen des Projekts WiGru-7 (FKZ 02 E 11102) besucht worden war, wurden von Messung von Adsorptionsisothermen von Bentonit vorgestellt, die sowohl präzise als relativ schnell durchgeführt werden konnten. Diese Methode könnte eine wertvolle Ergänzung der zurzeit laufenden Messungen darstellen. Über den theoretischen Physiker Teemu Laurila von VTT, der sich seit einiger Zeit für das GRS-Modell im Rahmen der Task Force EBS und der Clay Conference interessiert, kam es zu einem Kontakt mit Prof. Kataya an der Universität Jyväskylä in Finnland. Dort wurden röntgen-tomographische Aufnahmen der Bentonitaufsättigung gemacht, die in auffälliger Konsistenz mit dem Konzeptmodell der GRS stehen. Beide Seiten bekundeten hohes Interesse an einem Ideenaustausch. An der Universität Jyväskylä sind neue Experimente im Rahmen des finnischen Verbundprojektes THEBENS geplant.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Beendigung des Tests mit 30 °C; Erhöhung der Temperatur auf 60 °C
- Überprüfung der Sinnfälligkeit der alternativen Messmethoden an der EPFL Lausanne für BIGBEN
- Besuch bei Prof. Kataya in Jyväskylä zwecks Austausch und Mitgestaltung bei den neuen Aufsättigungsexperimenten

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik, Feld 3.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2014 bis 31.01.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 und in einem Teilbericht zusammengefasst. Der Bericht dient als Grundlage für die weiteren Arbeitspakete.

AP2.1:

Die Arbeiten im Berichtszeitraum sind durch die Untersuchungen zur Streckenlagerung von POLLUX[®]-Behältern im Salzgestein gekennzeichnet. Auf Basis des Einlagerungskonzeptes der "Vorläufigen Sicherheitsanalyse für Gorleben" (VSG) wurde das bisherige Rückholungskonzept weiter vertieft. Dies beinhaltet die detaillierte Ausarbeitung der notwendigen Betriebsabläufe. Alle Arbeitsschritte wurden in enger Abstimmung mit einer Klimavorausberechnung analysiert und geeignete Geräte entsprechend dem Stand der Technik ausgewählt. Die Ausarbeitung ermöglicht eine Abschätzung des Zeitaufwands der Rückholung. Mit Hilfe einer Klimavorausberechnung wurden die erwarteten Arbeitsbedingungen im Endlager während der Rückholung erarbeitet. Auf Basis der thermischen Berechnungen der VSG konnte die Temperaturverteilung im Grubengebäude innerhalb des Rückholungszeitraums beschrieben und mit dem Bewetterungskonzept verknüpft werden. Die Wärmeleistung der Behälter führt zu hohen Temperaturen und großen Temperaturgradienten. Während im Bereich der Richtstrecken und Querschläge noch mit moderaten Temperaturen zu rechnen ist, liegen die Temperaturen direkt an den Behältern schon nach wenigen Jahren nahe der Auslegungstemperatur. Mit Rücksicht auf die hohe Temperatur müssen einzelne Arbeitsschritte (z. B.: Vortrieb) mit einer reduzierten Leistung erfolgen. Eine Kühlung ist in jedem Fall nötig.

Zur Nutzung der Einlagerungsvorrichtung während der Rückholung sind mehrere Modifikationen an dem bestehenden Maschinenkonzept nötig. Für die Weiterentwicklung der Einlagerungsvorrichtung wurde ein detaillierter Anforderungskatalog erarbeitet. Die wesentlichen Modifikationen sind die Konstruktion eines neuen Aufnahmesystems ohne Nutzung der Tragzapfen, die Möglichkeit zur Handhabung unterschiedlicher Behältertypen, die Möglichkeit unter hohen Temperaturen zu arbeiten und die Umrüstung auf ein selbstfahrendes Raupenfahrwerk.

Zur Überprüfung der geomechanischen Bedingungen an den Rückholungsstrecken wurde mit der Erstellung eines numerischen Modells begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2.1: Die begonnenen Arbeiten werden im folgenden Berichtszeitraum abgeschlossen.

AP2.2: Im Anschluss an die Untersuchung der Streckenlagerung soll in gleicher Weise die bestehenden Planungen zur Rückholung aus der Bohrlochlagerung analysiert und vertieft bearbeitet werden. Dies beinhaltet eine detaillierte Beschreibung der Betriebsabläufe, eine Beschreibung der notwendigen Maschinenteknik sowie eine mögliche Anpassung der Einlagerungstechnik. Ein Schwerpunkt wird die Erarbeitung einer Technik zum Entfernen des Bohrlochversatzes sein. Zusätzlich sollen die herrschenden Temperaturen im Endlager und die geo-mechanische Stabilität der Strecken während der Rückholung beurteilt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Teilbericht zum AP1 (intern)

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11304
Vorhabensbezeichnung: Tonforschung im Untertagelabor Mont-Terri	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1, Wirtsgestein: Ton	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2014 bis 30.06.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
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 Larenexperimenten (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. Für die gekoppelte THM-Modellierung des FE-Experiments ist zurzeit ein plane-strain-Modell in Entwicklung, das sowohl für den erhitzten Bereich als auch für die Bereiche, in denen die Porendruckmessungen durchgeführt werden, eingesetzt werden kann.
- AP2: Der HE-E Versuch wurde störungsfrei weitergeführt. Der Buffer im zentralen und erhitzernahen Bereich ist immer noch entsättigt. Der tunnelnahe Gebirgsbereich steht noch unter Saugspannung.
Zur Überprüfung der Porendruckmessungen im tunnelnahen Bereich wird ein Laborversuch vorbereitet, der den Einfluss der Durchführung der Messleitungen durch den erhitzten Bereich ermitteln soll.
- 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 Dilatometerbohrlochs wird der Porendruck gemessen, der die zeitabhängige Verformung beeinflusst. Die Verformungsraten pendeln sich nach anfänglicher Abnahme auf einen quasistationären Wert von etwa 10^{-8} s^{-1} ein, der durch ein elastisches Modell mit hydraulisch-mechanischer Kopplung nicht erklärt werden kann, so dass viskose Deformation vermutet wird. Eine entsprechende Modellierung wird durchgeführt, sobald das im Projekt THM-Ton entwickelte Stoffmodell zur Verfügung steht.
- AP4: Im Experiment SB-A wurden die Porendruckmessungen weitergeführt. Eine Messstelle zeigt kontinuierlich den erwarteten Wert von ca. 1.5 MPa, während der Druck bei der anderen, direkt benachbarten Messstelle deutlich niedriger liegt (0.5 MPa), was möglicherweise auf eine Schädigung des Bohrlochnahbereichs zurückzuführen ist.
- AP5: Im tiefen DB-Bohrloch wurden von Solexperts im Auftrag des DB-Konsortiums Hydrotests (Konstantraten-Drucksenkungstests mit anschließender Einschließphase) zur Permeabilitätsbestimmung durchgeführt, die zurzeit ausgewertet werden.
- AP6: Für das LT-A Experiment wurden von GRS in Ergänzung zu den geplanten Versuchen der BGR je zwei einaxiale und triaxiale Kriechversuche sowie zwei Verheilungsversuche mit geschädigten Proben von Tonsteinen mit geringerem Tonmineralanteil und höheren Anteilen von Sand- und Karbonatkomponenten durchgeführt. Über diese wird im Projektstatusbericht THM-Ton (02E10377) berichtet.

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
- Durchführung von Laborexperimenten an Proben der sandigen und karbonatreichen Fazies und zugehörige Modellierung im LT-A Experiment

5. Berichte, Veröffentlichungen

Die Arbeiten der GRS in Mont Terri wurden beim GRS-Fachgespräch am 26./27.02.2015 in Berlin präsentiert.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11314
Vorhabensbezeichnung: Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen (KORPHA)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2014 bis 30.11.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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

Die fortgesetzte Literaturlauswertung bestätigte die bisherigen Feststellungen, dass in einem Endlager im Ton langfristig ausschließlich Fe(II)haltige Korrosionsprodukte zu erwarten sind. Im Hinblick auf das geochemische Nahfeldmilieu sind dabei diejenigen Festphasen von Interesse, die sich bei den jeweiligen Umgebungsbedingungen ins Gleichgewicht mit der Lösungsphase setzen können. Hierzu gehören nach derzeitigem Kenntnisstand das basische Fe(II)carbonat Chukanovit, das basische Fe(II)chlorid $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ sowie feste Lösungen dieser Endglieder mit Calcium und Magnesium.

Siderit ist zwar stabiler als Chukanovit, bildet sich aber wahrscheinlich erst sekundär aus Chukanovit. Fe(II)hydroxid wird bei Anwesenheit von Chlorid nicht gebildet, sondern immer $\text{Fe}(\text{OH})_3\text{Cl}$ oder Chukanovit (je nach Carbonatangebot). Das Fe-Analogon zu Chlorartinit ($\text{Mg}_2(\text{OH})\text{CO}_3\text{Cl} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$) wird nicht erwartet, da es wahrscheinlich hohe FeCl_2 -Lösungskonzentration voraussetzt, die so nicht auftreten.

Magnetit kann zwar bei den Bedingungen des Endlagers direkt gebildet werden, es setzt sich aber selbst nach Jahren nicht ins Gleichgewicht mit der umgebenden Lösung. Es stellt in einem weiten Eh-pH-Bereich die thermodynamisch stabilste Phase dar, die beobachtete Anwesenheit von weniger stabilen Verbindungen wie $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ zeigt aber, dass die Bildung von Magnetit kinetisch gehemmt ist und unter manchen Bedingungen ganz unterbleibt. Im Buffer wie auch im Wirtsgestein ist in etwas größerer Entfernung zur Korrosionsfront mit der Bildung Fe(II)-reicher Tonminerale zu rechnen wie Berthierin, Odinite, Greenalit und Cronstedit.

Green Rust-Verbindungen sind während der aerob-anaeroben Übergangsphase und als Produkt der Reduktion der in der aeroben Phase gebildeten Fe(III)oxyhydroxide zu erwarten. In Gegenwart von metallischem Eisen und Wasserstoff ist zu erwarten, dass sie zu reinen Fe(II)-Verbindungen oder Magnetit weiterreagieren. Zur Stabilität von Green Rust-Phasen liegen aber nur wenige Daten vor.

Für die experimentellen Arbeiten wurden zunächst folgende Festphasen ausgewählt: Chukanovit, $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ sowie feste Lösungen dieser Phasen mit den Mg-Analoga. Syntheseversuche zu grobkristallinem $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ führten bislang nicht zum Erfolg, werden aber fortgesetzt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterführung der Synthesen von $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$, Chukanovit und Magnesiumhaltiger fester Lösungen. Analyse der Löslichkeit dieser Phasen bei 25 °C und erhöhten Temperaturen.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2014 bis 30.09.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
Gesamtkosten des Vorhabens: 771.673,00 EUR	Projektleiter: Dr. Moog	

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

Die Projektplanung wurde nach dem Wechsel der Projektleitung einer Revision unterzogen. Sowohl bezogen auf die zu bearbeitenden Fragestellungen als auch auf die zeitliche Abfolge wurden die Arbeitspakete mit dem zum Teil parallel bearbeiteten Projekt LAVA (Förderkennzeichen 02 E 11122) abgestimmt. Für die Charakterisierung der Baustoffproben (spez. Oberfläche, Porosität, Phasenanalytik) wird nunmehr mit dem Institut für Baustoffe, Massivbau und Brandschutz (iBMB) in Braunschweig zusammen gearbeitet. Es wurde eine revidierte Projektplanung, die auch einen detaillierten Zeitplan enthielt, erstellt.

AP1:

Die Versuchsanweisung für die Durchführung von Kaskadenauslaugversuchen wird derzeit überprüft. Es haben Vorversuche zur Ermittlung der einzuhaltenden Äquilibrierungszeit begonnen.

Für die Durchführung von „Through-Diffusion“-Versuchen wurden Messzellen in Auftrag gegeben.

Aufbauend auf den Erkenntnissen aus dem Projekt LASA kann auf eine Durchführung von Advektionsversuchen mit Lösung an intakten Salzbetonprüfkörpern verzichtet werden. Im Rahmen des Projektes LASA konnte hierbei kein Lösungsfluss ermittelt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der Vorversuche für die Kaskadenauslaugung zur Bestimmung der Äquilibrierungszeit. Auf der Grundlage dieser Ergebnisse Wiederholung der Kaskadenversuche.
- Durchführung der Vorversuche für die „Through-Diffusion“-Versuche, um die Eignung der Messzellen zu belegen. Es werden Prüfkörper mit Höhen von 1, 2 und 3 cm verwendet.
- Durchführung eines Versuches zur Lösungsadvektion auf der Kontaktfläche Salzbeton / Steinsalz. Der Prüfkörper wird aus dem Projekt LASA übergeben und soll mit IP21-Lösung durchströmt werden.
- Herstellung weiterer Prüfkörper für die Untersuchung der Korrosion auf der Kontaktfläche Salzbeton / Steinsalz.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2014 bis 30.11.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 im Projekt geplanten Aufbauten von zwei elektrochemischen Zellen zur Messung der Ionen-Mobilität jeweils für Hoch- und Niederfrequenzbereichen sind bereits vollständig und erfolgreich durchgeführt.
- AP2: Durchführung von experimentellen Messungen der Ionen-Mobilität
Testversuche zur Optimierung der Niederfrequenzmesszelle wurden durchgeführt. Anschließend wurden CsCl-, KCl-, NaCl-, MgCl₂- und CaCl₂-Lösungen bei sieben Konzentrationen im Bereich 10⁻⁴-10⁻¹ mol Kg⁻¹ und unterschiedlichen Temperaturen im Bereich 20 °C – 90 °C mit der aufgebauten Technik erfolgreich gemessen.
- AP3: Auswertung der experimentellen Daten und systematische Darstellung der Ionen-Mobilität durch die MSA-Theorie
Die ersten Auswertungen der im AP2 gewonnenen experimentellen Daten sind bereits im Gang.
- AP4: Betreuung des Doktoranden
Der durch dieses Projekt eingestellte Doktorand zeigte eine große Motivation und seine experimentellen Arbeiten laufen planmäßig.
- AP5: Koordination des Verbundvorhabens
Eine Videokonferenz fand am 18. Mai für die Diskussion von Kooperations- und Zusammenarbeiten mit den Verbundpartnern statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weitere systematische Messungen im Niederfrequenzbereich von binären Sulfat-Systemen Na₂SO₄-H₂O und K₂SO₄-H₂O von 0.0001 bis 0.1 mol Kg⁻¹ und bei Temperaturen von 20 °C bis 90 °C.
- Testen und Kalibrierung der bereits gelungenen Hochfrequenzzelle (TDR).
- Aufbau eines Peltiers-Kontrollsystems zur Kontrolle der Temperatur an der Hochfrequenzzelle.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2014 bis 30.11.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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:
 - erste Versuche mit hochsalinaren Chlorid-, Karbonat-, Sulfat- und Phosphat-Systemen
 - Chlorid/Karbonat:
Uran(VI)-Fluoreszenz ist in 3 M NaCl-Lösung in Gegenwart und Abwesenheit von Karbonat möglich - im Widerspruch zur Literatur, welche mit steigender Chloridkonzentration ein zunehmendes Lumineszenz-Quenchen annimmt. Im Gegensatz dazu ist Lumineszenz des freien Uran(IV)-Ion unabhängig vom Chloridgehalt messbar
 - Sulfat:
Bestimmung der U(VI)-Speziation in Sulfat-Lösungen bei einer Ionenstärke von 1,5 M. Die aufgenommenen Uran-Absorptionsspektren und statischen Uran-Fluoreszenzspektren zeigen mit steigender Sulfat-Konzentration eine bathochrome Verschiebung. Eine erste Speziesanalyse zeigt die Bildung der $\text{UO}_2(\text{SO}_4)^0$ - und $\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2^{2-}$ -Komplexe.

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) in weiterer Abstimmung mit KIT-INE
 - Chlorid/Karbonat:
Spektroskopische Bestimmung der Uran(VI)-Speziation in 3 M NaCl-Lösung in Gegenwart und Abwesenheit von Carbonat
 - Sulfat:
Bestimmung der spektroskopischen Charakteristika der gebildeten Uran(VI)-Komplexe und Ableitung des Einflusses der Ionenstärke auf diese
 - Phosphat:
Identifizierung des Einflusses von Phosphat auf die Uran(IV)-Speziation
- Aufbau des Photoakustik-Messplatzes

AP3.4:

- Vertiefende Einarbeitung in Chemometrie zur Spektren-Interpretation

5. Berichte, Veröffentlichungen

Poster auf der ABC-Salt IV in Heidelberg: "EDUKEM project - first spectroscopic insights into the U(IV)/U(VI) speciation in concentrated NaCl solution"

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2014 bis 30.11.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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 Berichtszeitraums wurden folgende Arbeiten durchgeführt:

- In den ersten Monaten des Berichtszeitraums wurde die im Rahmen von EDUKEM angestellte Doktorandin, Frau Nese Cevirim in grundlegende Arbeitstechniken mit Uran im Kontrollbereich des INE eingearbeitet.
- Es wurde mit Frau Dr. Ezgi Yalcintas eine auf dem Gebiet der aquatischen Chemie und Thermodynamik sehr kompetente neue Mitarbeiterin in das Projekt integriert. (PhD am INE im Rahmen von VESPA).
- Es wurde eine detaillierte Literaturstudie zu U(IV)/U(VI) Redoxprozessen und der Uran-Löslichkeit bei Abwesenheit von Karbonat initiiert. Diese Arbeiten umfassen zu U(IV) analoge Th(IV) Systeme.
- In Experimentserien über den gesamten pH-Bereich (saure bis hyperalkaline Bedingungen) wurden Redoxexperimente mit U(IV)/U(VI) unter systematischer Verwendung verschiedener Redoxchemikalien durchgeführt. Die experimentellen Befunde wurden kritisch mit Modellrechnungen, basierend auf alten thermodynamischen Literaturdaten, verglichen.
- Zur Durchführung von Löslichkeitsexperimenten in KCl-Systemen notwendigen K-U(VI)-OH Festphasen wurden erfolgreich synthetisiert und charakterisiert. Die Matrixlösungen für die Experimente wurden erfolgreich vorbereitet.
- Synthese einer großen Menge $\text{UO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (Metaschöpit) unter Ar-Atmosphäre, als Ausgangsverbindung diverser später geplanter U(VI)-Löslichkeitsexperimente.

4. Geplante Weiterarbeiten

Für das zweite Halbjahr 2015 sind folgende Aktivitäten geplant:

- Abschluss der umfassenden Literaturstudie zu U(IV)/U(VI) Redoxprozessen und der Uranlöslichkeit bei Abwesenheit von Karbonat.
- Beginn einer Literaturstudie zur Löslichkeit von U(IV)/U(VI) bei Anwesenheit von Karbonat.
- Abschluss der Arbeiten zur Redoxchemie und Uran-Redoxstufenstabilisierung.
- Durchführung und Auswertung der Löslichkeitsexperimente in KCl. Beginn der Ableitung thermodynamischer Daten für diese Experimente.
- Kritische Analyse und ggf. Anpassung des thermodynamischen Modells für die U(VI)-Löslichkeit und -Speziation in NaCl und MgCl_2 Lösungen basierend auf 2003ALT/NEC. Berücksichtigung von SIT und Pitzer Ansätzen zur Beschreibung von Ion-Wechselwirkungsprozessen.
- Design von Löslichkeitsexperimenten mit tetravalentem U(IV) unter stark reduzierenden Bedingungen. Elektrochemische Präparation und Charakterisierung der U(IV) Ausgangslösungen. Detaillierte Analyse der U(IV) Stabilität unter den gewählten experimentellen Randbedingungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11344A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt A	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton	
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2015 bis 31.12.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015
Gesamtkosten des Vorhabens: 645.100,00 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. Das Hauptziel des Projektes ist es, den Umwandlungsmechanismus von Bentoniten als Funktion von Lösungszusammensetzung, Temperatur und mikrobieller Aktivität anhand von Laborversuchen aufzuklären. Konkret soll festgestellt werden, ob diese Einflüsse zu Änderungen des Fe(III)-Gehalts der reagierten Bentonite bzw. zu Änderungen des Quelldrucks und der Lösungspermeabilität von hochkompaktierten Bentoniten führen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Diese Aufklärung soll im Projekt anhand der Untersuchungen von 15 Bentoniten erfolgen, die mit einer auf den für die Endlagertiefe in der Unterkreidetonformation in Norddeutschland erwarteten Salzgehalt von 150 g/L verdünnten Gipshutlösung und der Opalinustonporenlösung bei 25 °C, 60 °C, 90 °C und 120 °C ein und zwei Jahre reagieren werden. Die durch die Reaktion veränderten Quelldruck und Permeabilität – sowie der Fe(II)/Fe(III)-Gehalt für mikrobielle Versuche – der Bentonite und die Hauptionkonzentrationen der reagierten Lösungen sollen erfasst werden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Auf dem Kick-off Treffen des UMB-Verbundprojektes am 28. Mai 2015 wurden die Details der Batchversuche, die im GRS-Labor laufen sollen, diskutiert. Die endgültige Festlegung der Lösungszusammensetzungen für die Versuche mit der verdünnten Gipshuttlösung sowie Lösungszusammensetzungen und Probenmengen für die mikrobiellen Versuche erfolgte bis Ende Juni in gegenseitiger Abstimmung. Anschließend wurden die noch fehlenden Chemikalien und Batchgefäße bestellt. Die Versuche werden nach dem Erhalt der Bestellungen voraussichtlich Ende Juli / Anfang August gestartet. Es erfolgt demnächst die Bestellung der Messzellen für Quelldruck- und Permeabilitätsmessungen sowie für deren Betrieb notwendiger Pumpen und Verbrauchsmaterialien.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Die Batchversuche werden angesetzt und ein bzw. zwei Jahre laufen.
- Die Messungen des Quelldrucks und der Permeabilität der Ausgangsbentonite sollen innerhalb eines Jahres nach dem Start der Batchversuche durchgeführt werden. Die Messungen des Quelldrucks und der Permeabilität der reagierten Bentonite erfolgt nach einem bzw. zwei Jahren nach dem Start der Batchversuche.
- Die Messungen des Fe(II)/Fe(III)-Gehaltes und der Haptonkonzentrationen der reagierten Lösungen erfolgen nach ein- bzw. zweijähriger Reaktionszeit.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11344B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2015 bis 31.12.2017	Berichtszeitraum: 01.04.2015 bis 30.06.2015	
Gesamtkosten des Vorhabens: 123.536,49 EUR	Projektleiter: Dr. Arnold	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel der Arbeiten ist die Entwicklung abgesicherter, objektiver Kriterien zur Auswahl geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle in Tonformationen. Die konkreten Ziele dieses Vorhabens sind: (1) Aufklärung des Lösungs- und Umwandlungsmechanismus von Smektiten (basierend auf dem GRS-Vorhaben „Fe-Bentonit“ und dem BGR Projekt „idealer Bentonit“) als Funktion von Lösungszusammensetzung und Temperatur anhand von Laborversuchen, optimierter Analytik und quantenmechanischer Modellrechnungen; (2) Identifizierung der Prozesse, die bei unterschiedlichen Bentoniten zu unterschiedlichen Reaktivitäten (Langzeitverhalten) führen; (3) Korrelierung der chemisch-mineralogischen Veränderungen der kompaktierten Bentonite mit Änderungen der hydraulischen Eigenschaften (Quelldruck und Permeabilität); (4) Untersuchungen zum Einfluss von Bakterien auf die Bentonitumwandlung; (5) Erläuterung der Rolle der Löslichkeit von Smektiten hinsichtlich der Fe-Korrosion und (6) Ableitung von Kriterien zur Auswahl optimal geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern.

Bisher ist es nicht hinreichend zuverlässig gelungen, alle relevanten experimentellen Daten zum Langzeitverhalten von Bentoniten im Kontakt zu Lösungen unter Endlagerbedingungen mit einem einheitlich abgesicherten Modell zu erklären. Eine Unsicherheit liefert in diesem Zusammenhang die Mikrobiologie. Reaktionen, die abiotisch nicht stattfinden, sind im Kontakt mit Mikroben möglicherweise als relevant anzusehen, da Mikroben spezielle Reaktionen katalysieren können.

Durch ein experimentelles und modelltheoretisches Arbeitsprogramm sollen Lücken im Prozessverständnis der Bentonitumwandlung im Kontakt zu Formationslösungen geschlossen werden. In dem hier vorgeschlagenen Vorhaben sollen zum ersten Mal vier in der Bentonitforschung ausgewiesene nationale Arbeitsgruppen zusammenarbeiten. Zum Erreichen der oben genannten Ziele sind aufeinander abgestimmte experimentelle und analytische Arbeiten in den Laboren der GRS, der Universität Greifswald und des HZDR vorgesehen. Dafür stellt die BGR 40 unterschiedliche, gut charakterisierte, Bentonite zur Verfügung, von denen 15 von der GRS auf ihre hydromechanischen Eigenschaften bei erhöhten Temperaturen untersucht werden. Zwei Bentonitproben werden mit Nährsubstraten in den Lösungen durchgeführt, um Informationen über eine mögliche Beteiligung von Bakterien an Mineralumwandlungen zu belegen oder auszuschließen.

Innerhalb der Kooperationspartner (Förderkennzeichen 02E11344): Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Abteilung Sicherheitsanalysen, Bereich Endlagersicherheitsforschung, Braunschweig; Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Institut für Geographie und Geologie, Greifswald; Technische Universität München, Theoretische Chemie

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP7.1.2: Einfluss von mikrobiellen Prozessen auf die Bentonitumwandlung

- Bestimmung der Zellzahl bzw. Zelldichte
- Bestimmung der mikrobiellen Diversität
- Real Time Quantitative PCR (oder Q-PCR)
- Kultivierung von Mikroorganismen auf geeigneten Nährmedien
- Catalyzed Reporter Deposition Fluorescence In Situ Hybridization (CARD-FISH)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP7.1.2:

Es wurden erste Versuche durchgeführt, um DNA aus einem der zwei ausgewählten Bentonite zu extrahieren. Von dem Bentonit B36 (Slowakei / Liskovec) wurden 10 g eingesetzt, um die DNA nach der Methode von Selenska-Pobell und Kollegen zu extrahieren. Die Methode wurde bereits erfolgreich bei Spanischen Bentonitproben aus Almeria eingesetzt. Leider war es im ersten Versuch noch nicht möglich, hochmolekulare DNA zu isolieren.

Selenska-Pobell S., Kampf G., Flemming K., Radeva G., Satchanska G. (2001): Bacterial diversity in soil samples from two uranium waste piles as determined by rep-APD, RISA and 16S rDNA retrieval. *Antonie van Leeuwenhoek* 79: 149–161.

Lopez-Fernandez, M., Cherkouk, A., Vilchez-Vargas, R., Jauregui, R., Pieper, D., Boon, N., Sanchez-Castro, I., Merroun, M. L. (2015): Bacterial diversity in bentonites, engineered barrier for deep geological disposal of radioactive wastes. *Microbial Ecology* online available DOI 10.1007/s00248-015-0630-7.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP7.1.2:

Die Methode der DNA Extraktion muss für die zu verwendenden Bentonite weiter optimiert werden. Eine Möglichkeit ist die Probenmenge zu erhöhen. Des Weiteren soll versucht werden, die Zellzahl und Zelldichte in den Proben zu bestimmen und geeignete Nährmedien ausgesucht werden, um Mikroorganismen zu kultivieren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald		Förderkennzeichen: 02 E 11344C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2015 bis 31.12.2017	Berichtszeitraum: 01.04.2015 bis 30.06.2015	
Gesamtkosten des Vorhabens: 169.289,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Warr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens sind Beiträge zur

- Aufklärung des Lösungs- und Umwandlungsmechanismus von Smektiten (basierend auf dem GRS-Vorhaben „Fe-Bentonit“) als Funktion von Lösungszusammensetzung und Temperatur anhand von Laborversuchen, optimierter Analytik und quantenmechanischer Modellrechnungen
- Identifizierung der Prozesse, die bei unterschiedlichen Bentoniten zu unterschiedlichen Reaktivitäten (Langzeitverhalten) führen
- Korrelierung der chemisch-mineralogischen Veränderungen der kompaktierten Bentonite
- Änderungen der hydraulischen Eigenschaften (Quelldruck und Permeabilität)
- Untersuchungen zum Einfluss von Bakterien auf die Bentonitumwandlung
- Erläuterung der Rolle der Löslichkeit von Smektiten hinsichtlich der Fe-Korrosion
- Ableitung von Kriterien zur Auswahl optimal geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern.

Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Förderprojekten 02E11344A und 02E11344B.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Analytik der Originalproben (XRD, TEM, CEC)
- AP2: Natürliches Analogon: Beprobung & Analytik
- AP3: Natürliches Analogon: Saponit / Experimente
- AP4: Vorversuche für mineralogische Analytik
- AP5: Vorversuche für Elektronen-Mikroskopie
- AP6: Natürliches Analogon: Saponit / Analytik
- AP7: Natürliches Analogon: Experimente & Analytik
- AP8: Analytik der GRS Reaktionsprodukte
- AP9: Auswertung (Mechanismen)
- AP10: Berichte

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Schwerpunkte der Arbeiten für das Verbundprojekt wurden seit Beginn auf die Vorbereitungen für die „Kick-off“-Konferenz bei der GRS in Braunschweig am 28. Mai 2015 gelegt. Während der Veranstaltung wurden die Vorhaben der Projektpartner vorgetragen. Des Weiteren und von besonderer Wichtigkeit für den Fortschritt des Verbundprojekts wurden die experimentellen Bedingungen des Batchexperiments diskutiert und festgelegt. Die Auswahl potentieller Fluidzusammensetzungen zur Untersuchung der zu erwartenden Bentonit-Alterationen wurde als entscheidendes Kriterium eingestuft. Es wurde sich auf eine Berücksichtigung geringer K-Konzentrationen für die verwendeten Lösungen, äquivalent zu natürlichen Wässern in Tonstein-Formationen, geeinigt.

Vorbereitende Experimente zur Analytik in den Einrichtungen des Instituts für Geographie und Geologie der Universität Greifswald wurden ebenfalls durchgeführt. Die notwendigen Vorkehrungen, wie Probenpräparationen und Kalibrierungen der Messinstrumente, vor dem Hintergrund die unbehandelten Bentonitproben analysieren zu können, wurden getroffen. Die Untersuchungen umfassen sowohl strukturelle als auch analytische Methoden, wie Röntgendiffraktometrie und Transmissionselektronenmikroskopie, die durch die sorgfältige Vorbereitung effizient genutzt werden können und Ergebnisse in vergleichbarer Qualität liefern. Der Fremdauftrag zum AP6 (s. o.) wurde ausgelöst. Es erfolgte inzwischen die Probenahme. Die Messungen der Proben (XRD, FT-IR, XRF, TEM, CEC) sind weitgehend abgeschlossen. Erste Auswertungen der Messungen lassen eine gute Widerspiegelung von Ausgangsgestein der Bentonitbildung, Verwitterungsprozessen und hydrothermalen Ereignissen auf Zusammensetzung und Stabilität des Bentonits erwarten.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der ersten Phase des Projekts werden die unbehandelten 15 selektierten Bentonit-Proben mithilfe der jeweiligen Methoden charakterisiert (Röntgenpulverdiffraktometrie, Transmissionselektronenmikroskopie, Kationenaustauschkapazität). Im Anschluss zu den Untersuchungen werden die Ergebnisse ausgewertet und mit relevanten Veröffentlichungen verglichen. Die erhobenen Daten der Ausgangsmaterialien dienen als Referenz und werden den nach den Experimenten alterierten Bentoniten gegenübergestellt.

Bei den Arbeiten zum Natürlichen Analogon (AP6) werden die Analysen vervollständigt und dann ausgewertet und hinsichtlich von möglicherweise erkennbaren Umwandlungsmechanismen interpretiert werden.

Durchflussreaktions-Experimente an Saponiten unter erhöhten Temperaturen, welche zur Ergänzung der im Rahmen des UMB-Verbundprojekts geplanten Experimente dienen, befinden sich in der Entwicklung. Das Hydratationsverhalten dieser Reaktionen wird in situ mithilfe von Röntgenpulverdiffraktometrie untersucht. Die Reaktionsprodukte werden anschließend durch Transmissionselektronenmikroskopie charakterisiert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstraße 12, 76131 Karlsruhe		Förderkennzeichen: 02 E 11355
Vorhabensbezeichnung: Eine experimentelle Analyse der Verhandlungen um ein Endlager für radioaktive Abfälle (Expander)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 5: Wissensmanagement ..., Feld 5.2, Wirtsgestein: unabhängig		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2015 bis 31.08.2017	Berichtszeitraum: 01.03.2015 bis 30.06.2015	
Gesamtförderbetrag des Vorhabens: 197.148,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Schultmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist es, die Herausforderungen der Allokation beständiger Gefahrgüter am Beispiel der Endlagerung radioaktiven Abfalls über wirtschaftswissenschaftliche Laborexperimente besser zu verstehen, Ansätze für eine Lösung dieses gesellschaftlichen Dilemmas zu identifizieren und (wirtschafts-)politische bzw. strategische Empfehlungen abzuleiten. Erstmalig soll das Problem gezielt in einer Serie von Laborstudien untersucht und sowohl theoretisch als auch empirisch fundierte Lösungsansätze zur Bewältigung der Herausforderungen im Prozess der Endlagersuche erarbeitet werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das vorliegende Forschungsvorhaben lässt sich als iterativer Prozess verstehen. Ausgehend von einem intensiven Studium der Literatur bezüglich vorheriger Laborexperimente und der Evaluation möglicher Experimentdesigns in Expertengesprächen wird ein grundlegendes Basisdesign entworfen, das im Laufe des Projekts unterschiedlich variiert wird. Jeder Schritt der erneuten Variation der zu beobachtenden Variablen (sog. Treatmentvariablen) geht somit auf eine begleitende Diskussion mit Experten und eine Literaturrecherche zurück. Damit kann für jede Untersuchungseinheit bzw. für jeden Analyseschritt die externe Validität gewährleistet werden. Das Projekt gliedert sich damit in zwei Phasen. Zum einen wird die Entwicklung eines Basisdesigns fokussiert, zum anderen wird dieses Design im weiteren Verlauf gezielt angewandt und variiert.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Mit Start des Projekts im März 2015 erfolgte eine Analyse der Literatur und bestehender Arbeiten in angrenzenden Bereichen. Diese dienen vorrangig zur Abgrenzung der eigenen Experimentdesigns von dem Bekanntem und bildet zugleich Impulse für das Konzept der Studie. Die Vorbereitung wurde dabei auch durch studentische Arbeiten bereichert und geht somit unmittelbar in die universitäre Lehre ein. Darüber hinaus wurden erste Ansprechpartner für die Interviews identifiziert und der Modus der Befragungen genauer bestimmt.

Gemäß Arbeitspaket 2 wurde zudem mit der Implementierung einer ersten Experimentserie begonnen, die sich zum jetzigen Zeitpunkt maßgeblich auf die Literatur und aktuelle Diskussionen stützt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Für 2015 sieht das Arbeitsprogramm die Durchführung und Auswertung der ersten Interviews und Experimente vor. Ein erster Entwurf des Fragebogens wird entwickelt, getestet und angepasst. Teilnehmer dieser ersten Befragungsrunde sind sowohl Studierende als auch ausgewählte, mit der Lagerung von Gefahrenstoffen befasste, Experten (mit überwiegend ingenieurwissenschaftlichem Hintergrund). Auf Basis der Vorarbeiten in Arbeitspaket 1 wird ein Basisdesign entwickelt, das sich im Labor durchführen und im späteren Verlauf gezielt variieren lässt. Die zentrale Versuchsanordnung (Ausgangsdesign) sieht vor, dass die Versuchspersonen über unterschiedliche Anfangsausstattungen an finanziellen Mitteln und (simulierten) Gefahrgütern verfügen und über die Allokation dieser Güter in Gruppen verhandeln. Die Experimente werden zumeist über mehrere Runden gespielt. Die Experimentumgebung wird auf einer am KIT entwickelten Java-Plattform implementiert, die Durchführung erfolgt im neuen „Karlsruhe Decision and Design Lab (KD2Lab)“. Jeder einzelnen experimentellen Versuchsbedingung liegt eine zuvor eindeutig formulierte und testbare Hypothese zugrunde. Um das im Labor beobachtete Verhalten überhaupt bewerten und auch im Hinblick auf Politikempfehlungen einordnen zu können, muss das dem Experiment zugrunde liegende Modell mathematisch bzw. spieltheoretisch analysiert werden. Eine dieser Hypothesen ist daher stets stringent aus der Theorie abgeleitet (theoretische Prognose bzw. theoretische Referenzlösung). Der Vergleich der experimentellen Ergebnisse sowie der Expertenaussagen mit der spieltheoretisch ermittelten Referenzlösung (dem sogenannten „sozialen Optimum“) gibt Aufschluss über die gesellschaftlichen Kosten und Stellschrauben des Konflikts.

Die Ergebnisse der Experimente werden zusammengefasst und interpretiert. Dabei wird auch auf die Validität der Aussagen und die Bewertung der Methodik hinsichtlich des Projektziels eingegangen. Zudem beinhaltet dies eine verstärkte Arbeit an der Publikation der Ergebnisse auf ausgewählten Konferenzen und in verschiedenen Fachjournalen. Im abschließenden Arbeitspaket werden die Ergebnisse für die Anwendung zusammengestellt und unmittelbare Schlüsse und Implikationen für die realen Prozesse abgeleitet. Ein besonderer Fokus wird dabei auf die wirtschaftspolitische Empfehlung gelegt. Die sprachliche Gestaltung wird bewusst so gehalten, dass alle Stakeholder der Standortsuche in Deutschland die Ergebnisse verstehen und verwenden können.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11365
Vorhabensbezeichnung: Lösungsverhalten von Spalt- und Aktivierungsprodukten im Nahfeld eines Endlagers (LÖVE)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2015 bis 31.05.2018	Berichtszeitraum: 01.06.2015 bis 30.06.2015	
Gesamtkosten des Vorhabens: 827.281,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hagemann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

- Ermittlung der Löslichkeitsgrenzen für Spalt- und Aktivierungsprodukte in salzhaltigen Wässern von norddeutschen Unterkreideton- und Steinsalzformationen
- Entwicklung von theoretischen Methoden zur Ableitung thermodynamischer Größen für Spalt- und Aktivierungsprodukte
- Abbau der Ungewissheiten in Bezug auf die geochemischen Eigenschaften dieser chemischen Elemente und Verbesserung der Belastbarkeit von Ergebnissen von geochemischen Modellrechnungen

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Auswertung von Korrosionsexperimenten an radioaktiven Abfällen
- Ermittlung von Bandbreiten für die Zusammensetzungen salzhaltiger Lösungen im Endlager
- Experimentelle Ermittlung maximaler Lösungskonzentrationen
- Ermittlung thermodynamischer Größen durch Schätzverfahren
- Geochemische Modellierung der Radionuklidkonzentration im Nahfeld
- Ableitung von Löslichkeitsgrenzen
- Überprüfung der Auswirkung neuer oder aktualisierter Löslichkeitsgrenzen auf die Ergebnisse von Langzeitsicherheitsanalysen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde damit begonnen, Daten zur Lösungszusammensetzung von Tiefenlösungen in norddeutschen Tonformationen zusammenzustellen. Eine wichtige Informationsgrundlage sind die Messungen im Zusammenhang mit der Erkundung des Schachtes Konrad sowie weitere in der norddeutschen Tiefebene vorgenommene Analysen von Tiefenlösungen. Obwohl ein genereller Zusammenhang zwischen Teufe und Salzgehalt als gesichert angenommen werden kann, lässt sich für einen konkreten Standort keine gesicherte Annahme über die dort anzunehmende Lösungszusammensetzung treffen. Dies hat zum einen damit zu tun, dass ein signifikanter Anteil der Informationen zu Tiefenlösungen aus der Erdgas- und Erdöl-Exploration stammt, die im Flankenbereich von Salzdomen gewonnen wurden und nicht repräsentativ für flache Tonlagerungen in größerer Entfernung von Salzdomen sind. Zum anderen liegt nur für einen Standort (Schacht Konrad) ein Teufen / Salinitätsprofil vor. An anderen Standorten kann der numerische Zusammenhang sowohl von der absoluten Höhe als auch vom Verlauf gänzlich abweichen. Dies zeigt schon der erhebliche Unterschied des Salinitätsprofils für Schacht Konrad vom mittleren Profil wie es sich aus der Gesamtmenge der Lösungsanalysen in Norddeutschland ergibt. Es wird daher bei der weiteren Auswertung der vorliegenden Literatur darauf geachtet, dass vor allem solche Analysen höheres Gewicht erhalten, die für flache Unterkreideton-Formationen in größerer Entfernung zu Salzdomen relevant sind.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung der Literaturstudie zu Lösungszusammensetzung tiefer Unterkreidetonformationen. Zusammenstellung von Daten zu potentiell auftretenden Lösungszusammensetzungen in Steinsalzlagerstätten.

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-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 6: Kernmaterialüberwachung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 30.09.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2015 bis 30.06.2015	
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

- Weiterentwicklung von Safeguardstechnologien:
 - a) Einschluss und Überwachung: Anforderungen in der Entsorgung von Brennelementen im Rahmen der integrierten Sicherungsmaßnahmen; b) Datenfernübertragung (DFÜ): Mitarbeit bei der Vereinbarung für die Implementierung der DFÜ von Safeguards-Daten aus den Standort-Zwischenlagern; c) Safeguardsanalytik: Gemeinsames Promotionsprojekt mit dem IAEO-Safeguardslabor zur Produktion von Referenzpartikeln; Promotionsprojekt zur Synthese von Kalibrierstandards und Referenzmaterialien; Qualifizierung Jülichs für das Netzwerk der IAEO-Analyselaboratorien (NWAL); d) Satellitenfernerkundung: Leitung des Projekts zum Einsatz von Fernerkundung in der IAEO; e) Geoinformationstechnologien: Erstellung der Anlagenpläne in einem digitalen, GIS-fähigen Format; f) Inspektionsplanung und -bewertung: Leitung eines Projekts zur Verbesserung der Kernmaterialüberwachung der IAEA unter Einbezug neuer analytischer Methoden aus Statistik, Operations Research und Spieltheorie.
- Neuentwicklung von Safeguardstechnologien:

- Erweiterte Machbarkeitsstudie zu Navigations- und Positionierungstechniken.
- Safeguards-by-Design (SBD):
Weiterentwicklung des Konzepts für verschiedene Anlagentypen.
 - Safeguards für Nuklearanlagen:
 - a) Geologische Endlagerung: Grundlagenermittlung zur Fortschreibung der Safeguardskonzepte und Auswirkungen der Rückholungs- und Bergungsoption auf Safeguardsmaßnahmen in verschiedenen Wirtsgesteinen; Leitung des Projekts zur 3D-Modellierung seismischer Ausbreitung für verschiedene Quellen; Leitung des Projekts zur gerichteten Radartechnologie; Mitarbeit in der Safeguards-Expertengruppe ASTOR der IAEO; b) 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; c) IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Auskünfte zu Anfragen des BMWi.
 - Weiterentwicklung des staatspezifischen Kontrollansatzes (SLC):
Akquisitionspfadanalyse (APA)
 - Kooperation mit der DGAP:
Expertensitzung bei der DGAP zu den Themen NVV-Überprüfungskonferenz 2015 sowie internationales Atomabkommen mit dem Iran (22.06.2015).
 - Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals „safeguards.de“.
 - ESARDA Mitarbeit:
Steering and Editorial Committee; AGn „Verification Technologies and Methodologies“, „Containment and Surveillance“, „Destructive Analysis“, „Training and Knowledge Management“ sowie „Implementation of Safeguards“.
 - Weitere Aktivitäten:
 - a) AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis: Mitarbeit und Teilnahme an den Sitzungen; b) INMM: Mitarbeit International Safeguards Division; JNMM Associated Editors, Co-Leitung AG “Open-source/Geospatial Information for Safeguards”; c) SAGSI: Mitarbeit.

4. Geplante Weiterarbeiten

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Veröffentlichungen im Tagungsband des 37th ESARDA Symposium, Manchester, 20.-24.10.2014:

Allen, K. et al.: Systems Approach to Arms Control Verification.

Jussofie, A. et al.: An update on the implementation of remote data transmission (RDT) in the dry interim storage facilities in Germany.

Listner, C. et al.: Formalizing Acquisition Path Analysis for the IAEA's State-Level Concept.

Middendorp, R. et al.: Preparation of Uranium Micro-Particles as Reference Material for Nuclear Safeguards.

Niemeyer, I.: Nuclear Verification from Space - Satellite Imagery within Nuclear Non- proliferation and Arms Control Verification Regimes.

Niemeyer, I. et al.: Integrated Analysis of Satellite Imagery for Nuclear Monitoring - G-SEXTANT Findings.

3 Verzeichnis der Forschungsstellen

Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover

- | | | |
|--------------------|---|----|
| 02 E 11061C | Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT) | 70 |
|--------------------|---|----|

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) | 24 |
| 02 E 10760 | Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsausgabe zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen - Kurztitel: URSEL | 30 |
| 02 E 11061B | Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein | 68 |
| 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 | 82 |
| 02 E 11152 | Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD) | 94 |
| 02 E 11182B | Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS | 98 |
| 02 E 11193B | Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen | 102 |
| 02 E 11263 | Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa) | 114 |
| 02 E 11294 | Entwicklung technischer Konzepte zur Rückholung von Endlagerbehältern mit wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen aus Endlagern in Salz- und Tongesteinsformationen (ERNESTA) | 120 |

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) | 32 |
|-------------------|---|----|

Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald
--

- | | | |
|--------------------|--|-----|
| 02 E 11344C | Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilproject C | 138 |
|--------------------|--|-----|

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)	74
-------------	--	----

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

02 E 10367	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	18
02 E 10377	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	20
02 E 10719	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	22
02 E 10740	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	26
02 E 10750	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaus-sage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen - Kurztitel: URSEL	28
02 E 10941	Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivi-tätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL	44
02 E 10951	Diffusion in kompaktiertem Salzgrus – DIKOSA	46
02 E 11061A	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein	66
02 E 11062A	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	72
02 E 11072A	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- K_d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	78
02 E 11102	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	86
02 E 11122	Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA	88
02 E 11132	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	90
02 E 11142	Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS	92
02 E 11182A	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioakti-ve Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS	96
02 E 11203A	Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhal-tung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e	104
02 E 11213	Qualifizierung der Rechenprogramme d^3f und r^3t , Kurztitel Quader	108

- 02 E 11243 Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborati-  110
ve und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Re-
kompaktionsverhalten der EDZ(LASA-EDZ)
- 02 E 11273 Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Vorprojekt  116
(UMB-V)
- 02 E 11284 Bentonitaufsättigung in geotechnischen Barrieren im Endlager-  118
Nahfeld (BIGBEN)
- 02 E 11304 Tonforschung im Untertagelabor Mont-Terri  122
- 02 E 11314 Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhal-  124
tiger Korrosionsphasen (KORPHA)
- 02 E 11324 Entwicklung eines chemisch-hydraulischen Modells für die Prognose  126
des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen (LAVA-2)
- 02 E 11334A Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experi-  128
menteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger
salinärer Lösungen; Teilprojekt A
- 02 E 11344A Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrie-  134
ren; Teilprojekt A
- 02 E 11365 Lösungsverhalten von Spalt- und Aktivierungsprodukten im Nahfeld  142
eines Endlagers (LÖVE)

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

- 02 E 10971 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im na-  50
türlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2:
Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf
- 02 E 11072B Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K_d-  80
Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR
- 02 E 11334B Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experi-  130
menteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger
salinärer Lösungen; Teilprojekt B
- 02 E 11344B Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrie-  136
ren; Teilprojekt B

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

- 02 E 10830 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehenswei-  36
sen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Ver-
halten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)

Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz

- 02 E 10981 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im na-  52
türlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Uni-
versität Mainz

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

- 02 E 11062C Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden  76
Rechnern mit d³f und r³t (H-DUR)

Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe

- 02 E 11355 Eine experimentelle Analyse der Verhandlungen um ein Endlager für radioaktive Abfälle (Expander)  140

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)  40

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  62

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)  38
- 02 E 10961 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie  48
- 02 E 11203B Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e  106
- 02 E 11334C Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt C  132

Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg

- 02 E 11092 Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1  84
- 02 E 11193A Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen  100

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)  42

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)  34
- 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  64

- 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)  112

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  60

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  56

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  54

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  58