

- | | | | |
|--------------------|---|--|-------|
| 02 E 11395 | Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschiechten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA) | Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover | 📖 130 |
| 02 E 11405C | Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschiechten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt C | IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig | 📖 136 |
| 02 E 11425 | Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Bautechnische Realisierung Technikumsprüfstand mit Durchführung und Auswertung erster Versuche (Salzschnittblöcke) | TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld | 📖 154 |
| 02 E 11435 | MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl ₂ -Lösung (MgO-SEAL) | Technische Universität Bergakademie Freiberg | 📖 156 |

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Redaktionelle Arbeiten zum Teilbericht.

AP2: Redaktionelle Arbeiten zum Teilbericht.

AP3: Abschluss der Arbeiten. Teilbericht liegt vor.

AP4: Im In-situ-Bohrlochversuch Asp-utB-02 wurde eine neue Gussasphaltrezeptur mit abgerundeten Basaltschotter als Stützkorn erfolgreich eingebaut. Die erreichte Einbauqualität und die gemessene Temperaturentwicklung entsprachen den Erwartungen.

Der In-situ-Großbohrlochversuch mit MgO-Beton der Rezeptur C3 wurde beendet. Durch partielles Freifräsen des umliegenden Gebirges wurde ein Teil der Einspannung reduziert. Infolgedessen haben sich an der Kontur die Kontaktdrücke verringert. Verformungen im MgO-Beton traten aber nur in Konturnähe auf. Weiterhin wurden Bohrkerne für nachfolgende Untersuchungen des Phasenbestandes, der Festigkeit und der Permeabilität gewonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Aufgabenstellung für einen Beton für einen verbleibenden Ausbau im Bereich der zukünftigen Dichtelemente in einem Schacht im Tongestein.

AP2: Keine weiteren Arbeiten.

AP3: Durchführung von Versuchen zur Messung der Scherviskosität von einem Destillationsbitumen (AZALT 70/100) und einem Oxidationsbitumen (STELOX 85/25) im Temperaturbereich (25 – 75) °C mit einer Kegel-Platte-Anordnung. Als Ergänzung werden mit beiden Bitumensorten zusätzlich Oszillationsversuche bei 25 °C und 45 °C durchgeführt. Die ermittelten Parameter fließen in die Modellierungsarbeiten des Projektpartners DBE TECHNOLOGY (AP5) ein.

AP4: Zurzeit keine weiteren Arbeiten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

R. Hoffmann: Untersuchungen zum Einbau einer neuen Asphaltrezeptur als Dichtelement in zukünftigen Schachtverschlüssen für HAW-Endlager. Diplomarbeit am Institut für Bergbau und Spezialtiefbau der TU Bergakademie Freiberg, 25.5.2016.

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 31.03.2017		Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 658.878,97 EUR		Projektleiter: Herold	

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

Der Schwerpunkt der Arbeiten lag auf dem Abschluss verbleibender Modellierungsarbeiten (AP5) und der Berichtserstellung.

Der Teilbericht AP1 lag zu Beginn des Berichtszeitraums bereits als überarbeitete Endfassung vor. Die Entwürfe aller weiteren Teilberichte wurden bis Ende Februar erstellt und zwischen den Projektpartnern ausgetauscht. Die Kommentierung und Überarbeitung der Entwürfe dauert bis zum Ende des Berichtszeitraums an. Der Teilbericht " Mikrostrukturelle Untersuchungen an Salzgrus-Ton-Gemischen und Bitumen-Steinsalz Proben" wurde als erster Bericht fertiggestellt und freigegeben.

Die numerische Modellierung von Setzungen einer Schottersäule wurde im Berichtszeitraum abgeschlossen. Abschließend kann festgestellt werden, dass sich der Modellierungsansatz für die Simulation granularer Medien unter Erdbebenbelastung eignet. Im Rahmen der Setzungsberechnungen wurden die wesentlichen physikalischen Prozesse und die Ausbildung eines Siloeffektes realitätsnah abgebildet. Mit Hilfe dynamischer Berechnungen konnte das Systemverhalten der Schottersäule unter einem dynamischen Lastfall simuliert werden. Allerdings wurde das Systemverhalten nur auf Plausibilität hin überprüft und eine belastbare Validierung der Ergebnisse mit Hilfe von z. B. Laborversuchen fehlt bisher gänzlich. Des Weiteren fehlen systematische Untersuchungen zum Einfluss verschiedener Rahmenbedingungen auf das Ergebnis, wie z. B. dynamische Randbedingungen, Dämpfung, 2D-Modell oder Wahl des Erdbebens. Erst dann können bisherige Abschätzungen zum Einfluss eines Erdbebens auf die Schottersäule verifiziert und neue technische Konzepte auf ihre Eignung mit Hilfe des beschriebenen Ansatzes untersucht werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.4:

Mit der Verlängerung und Aufstockung des Projektes ist vorgesehen, die Voraussetzungen für die Technologie des Beraubens des Schachtausbaus mit nachfolgendem auflockerungsminimierenden Nachschnitt der Gebirgskontur im Tongestein zu überprüfen. Das bestehende Modell zur ALZ um einen Schacht soll dazu weiterentwickelt werden. Ziel ist es, über eine HM-Verknüpfung aus den mittlerweile bekannten Spannungsumlagerungen die Änderungen der Permeabilität abzuschätzen.

AP6:

Abschluss Berichtserstellung aller Teilberichte und Freigabe, entsprechend der Absprachen mit TU Freiberg.

5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Jobmann: Mikrostrukturelle Untersuchungen an Salzgrus-Ton-Gemischen und Bitumen-Steinsalz Proben, Technischer Bericht, ELSA Phase II, Peine, März 2016

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: 01.01.2016 bis 29.02.2016	
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: Diskussion der Ergebnisse erster Rechnungen zur Speziation der in den Feldexperimenten verwendeten Radionuklide in Bentonit-Porenwasser und Grimsel-Grundwasser und Identifizierung relevanter Aspekte für einen internationalen Benchmark.

Dokumentation der Parametervariationsrechnungen zum Langzeitverhalten von Pu-242 und Am-243 und Vergleich mit den im Feldexperiment CFM RUN 12-02 von KIT-INE beobachteten Tailing im Sub-ppq-Konzentrationsbereich.

Abschluss der Auswertung der in allen CFM-Feldexperimenten beobachteten Wiedererhaltungsraten im Hinblick auf einen 2-Site Desorptionsprozess.

Abschluss der langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen für ein Endlager in Granit auf Basis der im finnischen Safety Case angenommenen Bedingungen.

AP3: Dokumentation aller Arbeiten für den Abschlussbericht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine. Das Projekt endete am 29.02.2016.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 31.05.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 31.05.2016
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 Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes wurde fortgesetzt.
 Ein Workshop zum Thema Skin-Effekt auf dem gemeinsamen Meeting der Task Forces EBS und GWFTS wurde initiiert. Zu diesem bislang immer nur in Einzelfällen dokumentierten Effekt wurden insgesamt 12 Präsentationen gegeben. Es stellte sich heraus, dass der Effekt nicht nur die Strömung sondern auch das Transportverhalten betrifft. Die Abstracts der Präsentationen sollen zusammen mit einer Abhandlung über mögliche Ursachen und die Relevanz für die Sicherheitsanalysen veröffentlicht werden.
 Task 9 wurde weiter beobachtet, um den Anschluss an die laufenden Arbeiten zu behalten und einen Einstieg zu finden. Auf dem gemeinsamen Meeting der TFs wurden letzte Ergebnisse zur Subtask 9a und erste Ergebnisse zu 9b vorgestellt. Ein Quereinstieg in die laufende Subtask 9b erscheint den Veranstaltern nach möglich, erfordert aber nach Einschätzung des Berichterstatters eine gewisse Einarbeitungszeit.
 Die Ergebnisse der Arbeiten zur Grundwasserströmung in geklüftetem Gestein im Rahmen von Task 8 wurden auf der 25. Tagung der FH-DGGV auf der Session „Endlager und Untertagedeponien“ vorgestellt.
 Fertigstellung eines Berichtentwurfs über die Grundwassermodellierung und die Bentonitaufsättigung zum BRIE-Projekt im Rahmen von Task 8.
 Fertigstellung eines Berichtentwurfs über die Grundwassermodellierung für das Prototype Repository im Rahmen von Task 8.
- AP3: Das auf Basis der von SNL erhaltenen Daten erstellte 6-Schichten-Modell der WIPP-Site wurde noch einmal verbessert und ein neues Prismengitter erstellt. Rechnungen mit freier Grundwasseroberfläche wurden durchgeführt.
- AP4: Nach der Übertragung der Features zur Simulation des Schadstofftransportes von r^{3t} (UG3) auf das neue d^{3f++} (UG4) durch die Entwickler am G-CSC der Universität Frankfurt wurden diese anhand von 2d Vergleichsrechnungen überprüft. Dabei wurde die mit PhreeqC Kopplung von d^{3f++} benutzt. Die Ergebnisse wurden einerseits mit einem empirischen Ansatz verglichen (Testfall 4.1) und andererseits mit Resultaten aus dem Projekt Weimar (Smart-KD-Konzept, Testfall 4.2).
- AP5: Der Projektabschlussbericht wurde weitgehend fertiggestellt.
- AP6: Die Algorithmen zum halbautomatischen Modellaufbau aus Rasterdaten im Präprozessor ProMesh wurden weiter verbessert. Die zwischenzeitlich von UG3 auf UG4 übertragenen Algorithmen zur Berechnung der freien Grundwasseroberfläche wurden zusätzlich für Prismengitter implementiert. Die Lösungsverfahren wurden angepasst.

4. Geplante Weiterarbeiten

Redaktion und Veröffentlichung des Projektabschlussberichtes.

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
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 im Bereich eines Schachtverschlusses für ein Endlager in Salzformationen. 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 zur Verfügung zu stellen.

Das Vorhaben wird in Kooperation mit dem Vorhaben LAVA 2 (Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen) 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: 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 Feuchteinfluss, 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 axial gelochte Steinsalzprüfkörper verwendet, die im Inneren Salzbetonkerne enthalten. Im vergangenen Jahr wurden dazu zwei Versuche mit in dieser Art kombinierten Prüfkörpern parallel durchgeführt und ausgewertet. 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. Bei einem weiteren Versuch konnte erst bei einer Minimalspannung von 10 MPa eine mit der Zeit weiterhin abnehmende Permeabilität bis in den Bereich von 10^{-18} m^2 beobachtet werden.

Bislang wurde davon ausgegangen, dass dieser Prozess (Reduzierung von Wegsamkeiten) auf das viskose Materialverhalten des Steinsalzes zurückgeführt werden kann. Durch die Erhöhung der Minimalspannung wird die Kontaktfuge geschlossen und die integral über die kombinierte Probe gemessene Laugendurchlässigkeit reduziert. Allerdings wurde dann im 2. Halbjahr 2016 bei der Präparation von kombinierten Probekörper für das parallel laufende Forschungsvorhaben LAVA-II ein weiterer gelochter Salzprüfkörper mit Salzbetonkern ohne Vorschädigung im Autoklaven bei sehr geringen Minimalspannungen von 1 MPa mit gesättigter Salzlauge beaufschlagt und die Laugenpermeabilität bestimmt. Die Kontaktfuge zwischen Salzbeton und Steinsalz hat sich bei dieser sehr geringen konstanten Minimalspannung über mehrere Wochen vollständig geschlossen und es war keine Lösungspermeabilität mehr messbar (letzter messbarer Wert im Bereich von 10^{-19} m^2).

Nach dem oben beschriebenen Verfahren wurde ein weiterer kombinierter Prüfkörper für einen Diffusionsversuche mit einer Ausgangslösungspermeabilität von 10^{-13} m^2 hergestellt. Hier wurde die Durchströmung mit Lösung bei Erreichen einer Lösungspermeabilität im Bereich von 10^{-15} m^2 abgebrochen, damit sich die Kontaktfuge nicht vollständig verschließen kann, da der Prüfkörper in einem weiterführenden Versuch verwendet werden sollte.

Gegenwärtig sind noch 9 weitere Versuche in Vorbereitung.

Derzeit kann auf Basis der durchgeführten Versuche nicht eindeutig belegt werden, ob der vorherrschende Prozess, der zur Reduzierung der Permeabilität führt, durch die Wechselwirkungen mit der gesättigten Salzlösung zu erklären ist, so dass die Minimalspannung in diesem Fall eher eine untergeordnete Rolle spielt bzw. unterstützend wirksam ist. Dazu sind in der weiteren Projektlaufzeit gezielte Versuche vorgesehen, die auch im Hinblick auf die modelltheoretischen Untersuchungen Auskunft über die dominierenden Prozesse geben sollen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung experimenteller Untersuchungen
- Durchführung modelltheoretischer Untersuchungen
- Dokumentation

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11253
Vorhabensbezeichnung: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung – Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 31.03.2016	
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 thermohydro-mechanischen 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

Verfassung des Abschlussberichtes.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

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: unabhängig		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 30.11.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
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 Berichtszeitraum wurde die redaktionelle Überarbeitung der Berichte

- AP2 "Übertragbarkeit der Methoden zur PSA für Kernkraftwerke auf Schachtförderanlagen" und
- AP5 "Maßnahmen zur Restrisikominimierung"

zur Übergabe an die GRS abgeschlossen.

- AP4 "Internationale Entwicklungen bei Sicherheitsanalysen zur Schachttransporttechnik" wurde hinsichtlich der aktuell im Rahmen der Betriebssicherheitsbewertungen der WIPP-Site erhaltenen Erkenntnisse ergänzt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im 2. Halbjahr (2016) werden die Berichte zum

- AP2 "Übertragbarkeit der Methoden zur PSA für Kernkraftwerke auf Schachtförderanlagen" und
- AP5 "Maßnahmen zur Restrisikominimierung"

der GRS zur Stellungnahme vorgelegt und der Abschlussbericht finalisiert.

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016
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 Entsaftung 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

Im Hauptversuch hatte sich Anfang des Jahres gezeigt, dass die meisten Proben schließlich ins Gleichgewicht mit der Luftfeuchtigkeit gekommen waren. Daraufhin wurde die Temperatur auf 60 °C erhöht. Die Exsikkatoren mit 33 %, 54 % und 97 % Luftfeuchtigkeit wurden jedoch nicht mit aufgeheizt. Die ersten beiden Exsikkatoren wurden stattdessen mit neuen Proben bei Raumtemperatur bestückt, weil die alten Proben durch die zu Beginn versehentlich zu hoch eingestellte Luftfeuchtigkeit offensichtlich gestört worden waren. Mit dieser Maßnahme sollen die beiden Datenpunkte auf der Isotherme für Umgebungstemperatur nachgemessen werden. Die Wasseraufnahme in den Proben im Exsikkator mit 97 % Luftfeuchtigkeit war immer noch nicht zum Stillstand gekommen, so dass es sinnvoller erschien, diesen speziellen Test bei Umgebungstemperatur fortzusetzen. Die letzten Daten zeigen, dass die Proben bei 60 °C ins Gleichgewicht mit der Luftfeuchtigkeit gekommen sind, so dass die Temperatur nun auf 90 °C erhöht werden kann. Die Exsikkatoren mit 33 % und 54 % Luftfeuchtigkeit werden dann ebenfalls in den Ofen gestellt werden.

Je Exsikkator/Luftfeuchtigkeitsstufe wurden vier Proben untersucht. Dabei zeigte sich eine deutliche Schwankung in den abgeleiteten Wassergehalten. Für die Bestimmung der Isothermen wurden daher jeweils die Mittelwerte der vier Proben zugrunde gelegt. Die beiden resultierenden Isothermen für Raumtemperatur und für 60 °C decken sich gut mit den bekannten Daten für MX-80. Der Einfluss der Temperatur steigt den Daten nach mit zunehmender Luftfeuchtigkeit an und führt dabei zu einer maximalen Abweichung von gut 1 % im Wassergehalt.

Aus den Poster-Beiträgen zur Clay Conference in Brüssel im letzten Jahr war ein Artikel über die grundlegende Ähnlichkeit des GRS-Modells und dem klassischen THM-Ansatz bezüglich der mathematischen Formulierungen hervorgegangen und eingereicht worden. Motiviert durch die Reviewer wurde das Paper um die Herleitung aller Ansätze aus einer einzigen allgemeinen Erhaltungsgleichung erweitert, um die Ähnlichkeit damit besser zu begründen. Der Artikel wurde inzwischen veröffentlicht.

Ein professionelles Gerät zur Feuchtebestimmung an kleinen Proben in einem Temperaturbereich bis zu 60 °C befindet sich nunmehr in der Beschaffung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erhöhung der Temperatur im Wärmeschrank auf 90 °C. Fortsetzung des Versuchs.

Fortsetzung der Arbeiten zu dem GRS-Bericht, der das bei der Clay Conference entstandene Paper um eine Reihe der dafür erforderlichen numerischen Untersuchungen ergänzt

Die Arbeiten am Code VIPER bezüglich der Verarbeitung von Daten für die Desorption bei einer Entsättigung waren zugunsten der Arbeiten zum Paper zurück gestellt worden und werden nun fortgesetzt. Parallel dazu wird weiterhin versucht, das VIPER unterliegende mathematische Modell auf COMSOL zu übertragen, um mehrdimensionale Rechnungen zu ermöglichen.

Erste Versuche, die gesuchten Isothermen mithilfe des neuen Geräts zur Feuchtebestimmung zu ermitteln und die vorhandenen Daten zu ergänzen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kröhn, K.-P.: Bentonite re-saturation: Different conceptual models – similar mathematical descriptions. FKZ 02 E 11284 (BMW). In: Norris, S., Bruno, J., Van Geet, M. & Verhoef, E. (eds) Radioactive Waste Confinement: Clays in Natural and Engineered Barriers. Geological Society, London, Special Publications, 443, <http://doi.org/10.1144/SP443.12>, The Geological Society, Special Issue, 2016.

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
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

- AP2: Die Arbeiten zum AP2 wurden mit dem Jahreswechsel weitgehend abgeschlossen. Im Berichtszeitraum erfolgte der Abschluss der thermo-mechanischen Berechnungen. Die Modelle zur Untersuchung der Hohlraumstabilität untermauern die Erkenntnisse aus der Klimavorausbetrachtung. Neben den hohen Temperaturen sind auch hohe Konvergenzen zu erwarten. Für eine Durchführung der bergbaulichen Tätigkeiten zur Rückholung von Endlagerbehältern ist eine weitere Anpassung der Umgebungsbedingungen erforderlich. Die beauftragten Firmen lieferten die Machbarkeitsstudien zur Saugkokille und der modifizierten Einlagerungsvorrichtung. In beiden Machbarkeitsstudien wird die Umsetzung als technisch machbar eingeschätzt.
- AP3: Mit Beginn des Berichtszeitraums erfolgte die Bearbeitung der Rückholbarkeit im Tongestein. Zunächst wurde die vertikale Bohrlochlagerung im Ton untersucht. Schwerpunkte waren die Beschreibung des Rückholungsablaufs, die Erarbeitung von Konzepten zur Neuauffahrung und dem Umgang mit dem Ausbau. Weiterhin wurden die notwendigen Änderungen erarbeitet, um die Einlagerungstechnik konstruktiv an die Erfordernisse der Endlagerung im Tongestein anzupassen. Über eine Klimavorausberechnung wurden die zu erwartenden Temperaturen im Rückholungsbergwerk und der Einfluss eines Feuchteintrages bestimmt.
- AP5: Es wurde begonnen, die Ergebnisse des AP2 in einem eigenen Teilbericht zu dokumentieren.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Die Arbeiten zur vertikalen Bohrlochlagerung werden im nachfolgenden Berichtszeitraum abgeschlossen. Im Anschluss daran erfolgt die Untersuchung der Rückholbarkeit für die Streckenlagerung in Tongestein.
- AP4: Innerhalb dieses Arbeitspaketes soll der notwendige Planungs- und Entwicklungsaufwand bis zur Genehmigungsreife der Saugkokille (für Salz und Ton) und der modifizierten Einlagerungsvorrichtung (mELVIS) in Form von vorgeschalteten Planungen, Untersuchungen und insbesondere von Demonstrationsversuchen abgeleitet werden.
- AP5: Die Projektergebnisse aller APs werden in einem zusammenfassenden Abschlussbericht dokumentiert. Darüber hinaus wird für AP2 und AP3 je ein zusätzlicher technischer Bericht als Anhang zum Abschlussbericht verfasst.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- P. Herold: Auswirkungen der Rückholbarkeit auf die Auslegung eines Endlagers für hochradioaktive wärmeentwickelnde Abfälle und ausgediente Brennelemente, Fachtagung „Kriterien für die Standortauswahl“, Berlin 29/30.01.2016
- P. Herold: Rückholbarkeit – eine Herausforderung für die Entwicklung von Endlagerkonzepten, 5. Essener Fachgespräch Endlagerbergbau, Essen, 25.02.2016
- P. Herold, S. Dörr, E. Kuate-Simo, W. Bollingerfehr, W. Filbert: Technical Approach for Retrieving Heat-Generating Waste from Repositories in Salt Formations, WM2016 Conference, March 6-10, 2016, Phoenix, Arizona, USA

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 647.987,00 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 Laborexperimenten (mit BGR)
- AP7: Technical und Steering Meetings
- AP8: Weiterentwicklung von VIRTUS für den Einsatz in Tonstein

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Messungen des Porendrucks in der Umgebung des FE-Tunnels dauern an und liefern aussagekräftige Ergebnisse. Die gekoppelte THM-Modellierung wird durchgeführt, sobald das Modell in VIRTUS (s. AP8) zur Verfügung steht.
- AP2: Der HE-E Versuch wurde störungsfrei weitergeführt. Der Buffer im zentralen und erhitzenahen Bereich ist immer noch entsättigt. Der tunnelnahe Gebirgsbereich steht noch unter Saugspannung. Mittels VIRTUS (s. AP8) wird ein 3D-Modell des Versuchs erstellt.
- 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. Während der gemessene Porendruck seit ca. einem Jahr stabil ist, ist weiterhin eine stetige Bohrlochkonvergenz messbar, was möglicherweise auf eine viskose Verformung zurückgeführt werden kann.
- AP4: Im Experiment SB-A erfolgten keine GRS-Aktivitäten im Berichtszeitraum.
- AP5: Die Porendruckmessungen im tiefen DB-Bohrloch wurden fortgesetzt.
- AP6: Gemeinsam mit BGR wurde ein Probenbohrloch in der sandigen Fazies erstellt. Die Proben werden für weitere Laborversuche zum Spannungs-Verformungsverhalten und zur Wasserretention eingesetzt.
- AP7: Beim Technical Meeting im Februar, das unter dem Zeichen des 20-jährigen Jubiläums des Mont Terri Projekts stand, wurde der Aufsatz „In-situ experiments on bentonite-based buffer and sealing materials at the Mont Terri rock laboratory“ vorgestellt, der im Swiss Journal of Geosciences veröffentlicht werden wird.
- AP8: Für den Einsatz von VIRTUS für Mont Terri wurden von Swisstopo die Hohlraumgeometrie sowie ein vorläufiges geologisches Modell zur Verfügung gestellt. Die Modelle wurden in VIRTUS eingelesen und werden zurzeit so bearbeitet, dass die notwendigen Kriterien (Geschlossenheit, Überschneidungsfreiheit usw.) erfüllt werden. Tunnelquerschnitte für die Erweiterung der Standardkomponenten-Bibliothek wurden ausgewählt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Messungen in den laufenden Experimenten
- THM-Prognose der Aufheizphase im FE Experiment (unter Einsatz von VIRTUS)
- 3D-Modellierung des HE-E (unter Einsatz von VIRTUS)
- 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

Klaus Wiczorek, Irina Gaus, Juan Carlos Mayor, Kristof Schuster, José-Luis García-Siñeriz & Toshihiro Sakaki: In-situ experiments on bentonite-based buffer and sealing materials at the Mont Terri rock laboratory, Swiss Journal of Geosciences (in Vorbereitung)

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
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

Löslichkeitsversuche wurden mit $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ (Fe-Hibbingit) und $\text{Fe}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3$ (Chukanovit) unternommen. Aufgrund der Oxidationsempfindlichkeit erfolgen alle Untersuchungen in streng sauerstofffreier Atmosphäre in einer Glove-Box. Die Durchführung bei konstanter Temperatur wird durch Einsatz von Stahlmänteln ermöglicht, die durch externe Thermostate temperiert werden können. Für Fe-Hibbingit wurde eine Löslichkeitskonstante gefunden, die mit Literaturdaten weitgehend identisch ist.

Der Löslichkeitsansatz mit Chukanovit ist bislang nicht interpretierbar. Der erreichte pH-Wert ist erheblich niedriger als erwartet und weist zusammen mit den Elementkonzentrationen in der Lösungsphase darauf hin, dass sich eine andere Phase gebildet hat. Sie ist wahrscheinlich natriumhaltig. Bislang sind in der Literatur keine basischen Eisen(II)carbonate bekannt, die zusätzlich Natrium enthalten. Wohl aber gibt es Nickel- und Cobalthaltige Festphasen, die sich ggf. analog auch mit Eisen(II) bilden.

Die Versuche werden fortgesetzt, um die Identität der gebildeten Phase zu klären. Zeitgleich werden weitere Ansätze gestartet, um Chukanovit auf anderem Wege zu erhalten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterführung der Synthesen von $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$, Chukanovit und magnesiumhaltiger fester Lösungen. Prüfung auf Bildung von Natriumhaltigen Eisen(II)Phasen in NaCl-reichen Lösungen.

Analyse der Löslichkeit dieser Phasen bei 25 °C und erhöhten Temperaturen. Ableitung von Bandbreiten für Löslichkeitskonstanten.

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
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 Kontaktflächen 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

- AP1: Die Batchversuche im System Salzbeton/Mg-reiche-Lösung wurden ausgewertet. Auf Grundlage der Lösungsanalysen wurde die Äquilibrierungszeit für die Kaskadenversuche auf 15 Tage festgelegt. Anhaltspunkt ist die Entwicklung der Ca-Konzentration in der Lösung aufgrund der Auflösung der CSH-Phasen. Die Batchversuche sind im Wesentlichen abgeschlossen. Zur Überprüfung der Entwicklung des Phasenbestandes über längere Zeiträume wurde die Versuchsanordnung bislang nicht abgebaut. Es werden in Abständen von mehreren Wochen weiterhin Proben genommen.
- Die Kaskadenversuche im System Salzbeton/Mg-reiche-Lösung wurden im Frühjahr 2016 begonnen.
- Die Vorversuche der Through-Diffusion-Versuche zur Ermittlung der geeigneten Prüfkörperhöhen dauern an. Die Prüfkörper befinden sich noch immer in der ersten Phase des Versuches, da auch nach 9 Monaten noch keine Aufsättigung der Prüfkörper festgestellt werden konnte.
- Es wurde ein Advektionsversuch an einem kombinierten Prüfkörper aus Salzbeton/Steinsalz durchgeführt: Dieser wurde unter einem Manteldruck von 2 MPa im Autoklaven mit NaCl-Lösung durchströmt. Es zeigte sich, dass sich die Kontaktfuge zwischen Salzbeton und Steinsalz über mehrere Wochen vollständig schloss und keine Lösungspermeabilität mehr messbar war.
- Nach oben beschriebenen Verfahren wurde ein kombinierter Prüfkörper für einen Diffusionsversuche im HZDR hergestellt. Hier wurde die Durchströmung mit Lösung abgebrochen, bevor sich die Kontaktfuge vollständig geschlossen hatte. Der Prüfkörper befindet sich seit Mai im HZDR zur PET-Messung.
- AP2: Es wurden erste Modellrechnungen mit PHREEQC durchgeführt, um die Zusammensetzung des Baustoffes für die Rechnungen anzupassen. Für weitere Arbeiten sind die Ergebnisse der Kaskadenversuche abzuwarten.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung und Abschluss der Kaskadenversuche im System Salzbeton/Mg-reiche-Lösung.
- Fortführung der Herstellung der kombinierten Prüfkörper aus Salzbeton/Steinsalz für Advektions- und Diffusionsversuche.
- Weitere Beobachtung der Aufsättigung der Through-Diffusion-Versuche. Es wird erwartet, dass die Diffusion auf der Kontaktfuge für den Transport von Radionukliden im Salzbeton die größere Relevanz besitzt und daher Through-Diffusion-Versuche an kombinierten Proben aussagekräftiger sind. Trotzdem soll die Entwicklung der Aufsättigung an den reinen Salzbetonproben weiter beobachtet werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Jantschik, K., Herbert, H.-J., Hertes, U., Meyer, T., Moog, H. C. (2016): Full scale demonstration of plugs and seals (DOPAS), Deliverable D3.29. Status report on LAVA related laboratory tests and on process modeling activities, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-Bericht 3850, February 2016
- Czaikowski, O., Jantschik, K., Moog, H.C., Wiczorek, K., Zhan, C.-L. (2016): CH/HM coupled behavior of shaft sealing materials, DOPAS-Seminar 2016, Turku (Finland)
- Jantschik, K., Moog, H.C. (2016): Investigation of Chemical-hydraulic Behaviour of Cement based Sealing Materials in Rock Salt (DOPAS-Project), DOPAS-Seminar 2016, Turku (Finland)

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016
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

Durchführung von experimentellen Messungen der Ionen-Mobilität (AP2)

Ein neuer Sensor für die Hochfrequenzanlage (TDR) wurde angefertigt und getestet. Dieser besteht aus einem mit Gold beschichteten biegesteifen Präzisions-Koaxialkabel, welches den anfangs auf zwei Goldplatten basierenden Ansatz ersetzt. Vorversuche haben nun ein optimales Antwort-zu-Rauschen-Verhältnis bei der Messung von Elektrolytlösungen gezeigt. Diese Entwicklung lief iterativ mit der Verbesserung der Software zur Auswertung der TDR-Daten.

Darüber hinaus wurden Messungen im Niederfrequenzbereich (Impedanzanlage) systematisch in CsCl-, KCl-, NaCl-, MgCl₂- CaCl₂-, Na₂SO₄ und K₂SO₄-Lösungen im Konzentrationsbereich 0.1-0.5 mol Kg⁻¹ fortgeführt, als Erweiterung der vorherigen Messreihe in verdünnteren Lösungen. Der Einfluss der Zellenlänge wurde zusätzlich untersucht.

Auswertung der experimentellen Daten und systematische Darstellung der Ionen-Mobilität durch die MSA-Theorie (AP3)

Wie im letzten Bericht bereits bekannt gegeben, haben sich die in der Literatur zu findenden Modelle zur Interpretation der Impedanzmessungen (Coehlos' Modell) für unser Messsystem als ungeeignet erwiesen. Eine Methode wurde daher erfunden. Diese basiert auf der Modellierung der Impedanzdaten mittels eines semi-empirischen elektrischen Ersatzschaltbilds und der Benutzung von CsCl als Referenzsystem. Die Methode, obwohl vielversprechend, muss noch weiter gecheckt werden.

Durchführung der potentiometrischen Messungen (AP4)

Erste elektrochemische und spektroskopische Experimente am Redoxsystem U(VI)/U(IV) in HCl-Lösungen wurden mittels eines zweiwöchigen Aufenthalts im Labor am HZDR durchgeführt. Ziel dieser Experimente ist die Charakterisierung des Redox-Verhaltens und der Speziation des U(VI)/U(IV)-HCl-Systems zur Gewinnung von thermodynamischen relevanten Daten.

Betreuung des Doktoranden (AP5)

Der durch dieses Projekt eingestellte Doktorand zeigt immer noch eine große Motivation an den experimentellen Arbeiten. Außerdem kommt er zu seinen Verpflichtungen an der Universität problemlos nach.

Koordination des Verbundvorhabens (AP5)

Eine Video-Konferenz fand am 29. April zur Besprechung des Fortschrittes der geplanten Arbeiten, der technischen Schwierigkeiten der experimentellen Ansätze sowie des weiteren Vorgehen bzgl. Kooperationen statt.

Der Kooperationsvertrag zwischen den beteiligten Partnern wurde unterzeichnet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Messung und Auswertung der Ionen-Mobilität (AP2/AP3)

- Systematische Messungen von CsCl-, KCl-, NaCl-, MgCl₂- CaCl₂-, Na₂SO₄ und K₂SO₄-Lösungen mit dem neuen aufgebauten TDR-Sensor.
- Fortsetzung der systematischen Messungen von CsCl-, KCl-, NaCl-, MgCl₂- CaCl₂-, Na₂SO₄ und K₂SO₄-Lösungen mit der Impedanzanlage und Auswertung im Bereich 0.5 mol Kg⁻¹ bis zur Sättigung bei 25 °C.
- Weiterentwicklung der Auswertungsmethode zur getrennten Berechnung der Mobilität und der mobilen Ionen von Impedanzspektren.
- Fortsetzung der elektrochemischen und spektroskopischen Experimente des U(IV)/U(VI)-HCl-Systems am HZDR.

Koordination des Verbundvorhabens (AP5)

Vor- und Nachbereitung des 3. Projekttreffens zum Verbundvorhaben EDUKEM in November 2016 in Dresden-Rossendorf.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Präsentation der Untersuchungsergebnisse am U(VI)/U(IV)-Redoxsystem auf der Herbsttagung der The Electrochemical Society (Prime) im Oktober 2016 in Honolulu, Hawaii, USA

Erstellung zweier Veröffentlichungen in internationalen Fachjournalen

R. Pattnaik, A.G. Muñoz, Ion mobility in concentrated electrolytes studied by AC-Impedance: an experimental approach for measuring membrane potentials, Ora presentation, The Electrochemical Society, annual meeting, June 2016, San Diego USA.

R. Pattnaik, A.G. Muñoz, Ion mobility in concentrated electrolytes studied by AC-Impedance: an experimental approach for measuring membrane potentials, ECS-Transactions, Modeling, from elucidation of physical phenomena to applications in design, in print.

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
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

AP1:

- Bestimmung des Oxidations-/Reduktions-Potentials von U(IV) in Porenwässern mittels Cyclovoltammetrie
- Zusammenarbeit mit GRS: Cyclovoltammetrie des U(IV)-Chlorid-Systems zur Bestimmung des Redoxpotentials

AP3.1:

- Erstellung von Referenzspektren für U(IV)-Phasen aus den Sammlungen der TU Bergakademie Freiberg und den Senckenberg Naturhistorische Sammlungen Dresden mittels Raman-Spektroskopie (Voruntersuchung für Fluoreszenz-Messungen an U(IV)-Festphasen).
- Synthese von UCl_4 als Ausgangsstoff für spektroskopische Untersuchungen.

AP3.2:

- Identifizierung des Einflusses von Phosphat auf die U(IV)-Speziation in Lösung mittels UV-vis und TRLFS.
- Spektroskopische Charakterisierung der Speziation von U(IV) bei hohen Ionenstärken mittels UV-vis.
- Umbau des TRLFS-Messplatzes für Untersuchungen von U(IV) und Aufbau einer TRLFS-Tieftemperaturmessapparatur
- TRLFS-Messungen an U(IV)-Referenzlösungen (Perchlorat, Chlorid, Sulfat, Karbonat) bei Raumtemperatur und Tieftemperatur, zur Erstellung von Referenzspektren und Bestimmung der Lebenszeiten verschiedener Komplexe.
- Überarbeitung der Software des Photoakustik-Messsystems (LIPAS) (in Arbeit).

4. Geplante Weiterarbeiten

AP3.1:

- Prüfen von Reinheit (Ausschluss von Mischphasen) und Oxidationszustand von U(IV)/U(VI) Mineralen aus den Sammlungen mittels Mikroskopie (REM, TEM, XRD) und Spektroskopie (EXAFS).
- Synthese weiterer U(IV)-Phasen zur Charakterisierung Fluoreszenz und Speziation.
- Aufbau einer Apparatur für Feststoff-TRLFS/-Fluorometry

AP3.2:

- Löslichkeitsversuche, Speziation und Spektroskopie (TRLFS, UV-vis) im System U(IV)- PO_4 (Zusammenarbeit mit KIT-INE, Juli 2016 bis Feb 2017)
- Test der Eignung von TRLFS zur Speziationsbestimmung im System U(IV)- SO_4 -Cl
- Weitere Untersuchung der U(IV)-Speziation bei hohen Ionenstärken mittels UV-vis und TRLFS
- Chlorid/Karbonat: Spektroskopische Bestimmung der U(VI)-Speziation in 3 M NaCl als Funktion des Carbonat-Gehaltes.

AP3.4:

- Vertiefende Einarbeitung in Chemometrie zur Spektreninterpretation

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11334C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-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: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
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

(Gesamtprojekt EDUKEM, Arbeiten von INE)

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:

- Redoxexperimente mit Uran in verd. bis konz. NaCl und MgCl₂ Lösungen wurden abgeschlossen. Experimente in CaCl₂ haben längere Kinetiken und müssen weiterhin verfolgt werden.
- Start der Erstellung eines Manuskripts von Cevirim et al. zu Uran-Redoxchemie.
- Erste Analyse mit XPS der beobachteten Uran-Festphasenpräzipitate. Zusätzliche Messungen sind nach Beendigung der Experimentserien erforderlich.
- Löslichkeitsexperimente mit U(VI) in alkalischen KCl Systemen mit K₂U₂O₇·xH₂O(s) wurden nahezu abgeschlossen, inklusive der Ableitung thermodynamischer Daten. Neue ausgedehnte Experimentserien mit UO₃·2H₂O(cr) in sauren KCl Lösungen wurden, aufgrund der von INE hier aufgezeigten engen Analogie zu bekannten NaCl Systemen im alkalischen pH Bereich, experimentell nicht weiter verfolgt.
- Erstellung des Manuskript zur U(VI) Löslichkeit in NaCl und MgCl₂ basierend auf [2003ALT/NEC] wurde nahezu abgeschlossen.
- Beginn der Löslichkeitsexperimente mit U(IV) in carbonatfreien NaCl, MgCl₂ und CaCl₂ Lösungen.
- Beginn der Löslichkeitsexperimente mit U(IV) in carbonathaltigen Lösungen im System NaCl-NaHCO₃-Na₂CO₃.
- Vorläufige TRLFS Experimente im System U(VI) in konz. CaCl₂. Die Arbeiten zeigen die Notwendigkeit neuer Messungen, die im nächsten Halbjahr erfolgen sollen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Redoxexperimente in verd. bis konz. CaCl₂ Systemen, inklusive nachfolgender Festphasencharakterisierung.
- Einreichen des Manuskripts (Cevirim et al.) zu "Uranium redox processes in dilute to concentrated saline systems".
- Abschluss der Löslichkeitsexperimente mit U(VI) in alkalischen KCl Systemen inkl. Festphasenanalyse und thermodyn. Modell. Beginn Erstellen einer Publikation.
- Einreichen Manuskript von Altmaier, Yalcintas et al., zur U(VI) Löslichkeit und Thermodynamik in NaCl und MgCl₂ Systemen (SIT, Pitzer).
- Abschluss Löslichkeitsexperimente mit U(IV) in verdünnten bis konzentrierten NaCl, MgCl₂ und CaCl₂ Lösungen unter Carbonatausschluss.
- Abschluss Löslichkeitsexperimente mit U(IV) in NaCl-NaHCO₃-Na₂CO₃ Systemen.
- Neue TRLFS Analysen zur U(VI) Speziation in konzentrierten CaCl₂ Lösungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Posterpräsentation N. Cevirim et al.: „Redox chemistry and solubility of Uranium in alkaline to hyperalkaline NaCl/KCl systems“, Konferenz "Mechanisms and Modelling of Waste/Cement Interactions", May 22-25, 2016, Murten, CH. Ausgezeichnet mit Posterpreis!
 Abstract Yalcintas et al.: „Solubility of UO₂(am,hyd) in alkaline carbonate solutions“ für ISSP Konferenz „17th International Symposium on Solubility Phenomena and Related Equilibrium Processes“, July 24-29, 2016, Geneva, Schweiz.

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016
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

Im Berichtszeitraum erfolgte die Ansetzung der 19 von insgesamt geplanten 34 Batchversuchen bei 120 °C mit 15 Bentoniten, zwei Lösungen und zwei Versuchsdauern (1 Jahr und 2 Jahre). Allerdings sind vier der 19 verschweißten Glasgefäße ein bis zwei Tage nach Beginn der thermischen Behandlung in einem Thermoschrank explodiert. Alle Bentonitversuche bei 120°C wurden daher abgebrochen. Um die Arbeitssicherheit der Labormitarbeiter zu gewährleisten, wurden die Laborvorschriften des Weiteren dahingehend geändert, dass die Bentonitversuche bei erhöhten Temperaturen nur in Kunststoff- bzw. Metallgefäßen, die dem in Batches erzeugten Gasdruck standhalten können, durchgeführt werden dürfen. Es wurde ein Testgefäß aus Teflon von einer beauftragten Firma angefertigt. Derzeit erfolgt die Prüfung seiner Einsatzfähigkeit. Vorausgesetzt einer erfolgreichen Prüfung soll ein Teil der abgebrochenen Bentonitversuche in Teflongefäßen bei 120 °C durchgeführt werden.

Eine kürzlich veröffentlichte systematische Analyse der hydraulischen Risserzeugung in Bentoniten [Chen et al. (2016): Advances in experimental investigation on hydraulic fracturing behavior of bentonite-based materials used for HLW disposal. Environ Earth Sci 75:787] zeigt zudem, dass die im UMB-V Projekt eingesetzte Messmethode der Lösungspemeabilität der Bentonite nicht dem Stand der Wissenschaft entspricht. Dies begründet sich darin, dass in dieser Methode ein Lösungsinjektionsdruck von bis zu 10 MPa angesetzt wurde, während bereits bei Lösungsinjektionsdrücken von einigen MPa in kompaktierten Bentoniten Risse – und damit bevorzugte Migrationspfade für Lösungen – gebildet werden können. Die Rissbildung in einem ungesättigten Bentonitpellet kann außerdem zu einer Kanalisierung und damit zu Verfälschung der Quelldruckmessung aufgrund einer unvollständigen Quellung des Pelletmaterials führen. Es wurde daher beschlossen, sowohl den Quelldruck als auch die Lösungspemeabilität mit geringen Injektionsdrücken durchzuführen. Da solche Messungen deutlich längere Versuchsdauer benötigen, wird die Dicke der zu untersuchenden Bentonitpellets von geplanten 2 cm auf 1 cm reduziert. Bei solchen Messungen kann eine Mehrzahl der Messzellen mit einer einzigen Pumpe und mit einer Waage per Messzelle (alternativ auch mit einer Bürette) betrieben werden. Dies ermöglicht, anstatt der geplanten Anschaffung von vier Pumpen und acht Waagen weitere Messzellen anzuschaffen, damit möglichst viele reagierte Bentonite untersucht werden können.

Es wurden für alle Bentonite und zwei Versuchslösungen pH-Messungen bei Labortemperatur durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Die Batchversuche bei 120 °C werden angesetzt und ein Jahr laufen (Voraussetzung: erfolgreicher Test der Teflongefäße).
- Die Messungen des Quelldrucks und der Permeabilität der Ausgangsbentonite sollen gestartet werden. Die Messungen des Quelldrucks und der Permeabilität der reagierten Bentonite erfolgen nach einem bzw. zwei Jahren nach dem Start der Batchversuche.
- Die Messungen des Fe(II)/Fe(III)-Gehaltes und der Hauptionkonzentrationen 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: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 202.583,00 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:

Die Methode von Selenska-Pobell und Kollegen¹, welche für die Verwendung von Bentonit geringfügig modifiziert wurde, ist auch nach Testung mehrerer käuflich erwerblicher DNA Extraktionskits, die am besten geeignete Methode. Da aufgrund zeitlicher Verschiebungen die ersten mikrobiologischen Proben von der GRS erst im September bereitgestellt werden können, nutzten wir die Zeit um im Rahmen einer Masterarbeit die mikrobiell bedingte Transformation des Bentonits B36 (Slowakei/Liskovec) im Rahmen einer Mikrokosmos Studie näher zu untersuchen.

Hierfür wurde unbehandelter Bentonit B36 erneut von der BGR bestellt. Für die Mikrokosmos Studie wurde dieser mit steriler, anaerober synthetischer Opalinustonporenlösung versetzt. Die Zusammensetzung der Lösung, das Verhältnis zwischen Bentonit und Lösung sowie die Zugabe von Substraten und deren Konzentration erfolgte entsprechend den mikrobiologischen Ansätzen der GRS. Die Proben und entsprechende Kontrollansätze wurden bei 30 °C im Dunkeln inkubiert. Die Probenahme erfolgt an ausgewählten Zeitpunkten über einen Zeitraum von etwa 3 Monaten. Die genommenen Proben wurden geochemisch sowie molekularbiologisch analysiert. Nach den ersten Messungen konnte gezeigt werden, dass sich in allen Mikrokosmen anaerobe Bedingungen eingestellt haben. Der pH-Wert und die Sulfatkonzentration zeigten in den ersten 4 Wochen noch keine signifikante Änderung wohingegen das Redoxpotential langsam sank. Außerdem konnte vor allem in den Ansätzen mit Substrat (Laktat, Acetat, Methanol und AQDS) eine signifikante Abnahme der Fe(III)-Konzentration und eine damit einhergehende Zunahme der Fe(II)-Konzentration festgestellt werden. Da dies nicht bei den mit Substrat versehenen sterilen Ansätzen (autoklavierter Bentonit) zu beobachten ist, kann diese Beobachtung auf die Aktivität von Mikroorganismen zurückgeführt werden. In den Ansätzen ohne Substrat zeigt sich ebenfalls keine Veränderung in der Fe(II)- und Fe(III)-Konzentration. Die Substrate sind demnach für eine signifikante Fe(III)-Reduktion in dem betrachteten Zeitraum notwendig. Da aufgrund technischer Probleme die HPLC derzeit nicht verwendet werden kann, konnten Veränderungen in der Acetat-, Laktat- und Methanol-Konzentration bisher noch nicht näher analysiert werden.

Von dem für die Mikrokosmen verwendeten, unbehandelten Bentonit B36, dem weiterverarbeiteten, pulverisierten B36 der GRS sowie aus den Mikrokosmenansätzen verschiedener Inkubationszeiten selbst konnte DNA isoliert und näher analysiert werden. Durch Verwendung von RISA (Ribosomal Intergenic Spacer Analysis) konnten Unterschiede in der mikrobiellen Gemeinschaft bereits durch elektrophoretische Auftrennung in einem Agarsegel nachverfolgt werden. Dabei zeigte sich, dass die Profile des pulverisierten B36 sowie des unbehandelten B36 nahezu identisch sind und ein deutlicher Unterschied zwischen den Mikrokosmen mit Substrat und ohne Substrat nach einer Inkubationszeit von 2 Tagen erkennbar ist. Die unterschiedlichen Fragmentmuster lassen auf Unterschiede in der Zusammensetzung der mikrobiellen Gemeinschaft in den Mikrokosmenansätzen schließen.

Für eine nähere Analyse der mikrobiellen Gemeinschaft wurde ein etwa 500 bp großes Fragment der 16S rDNA der extrahierten DNA amplifiziert und anschließend mittels MiSeq Illumina sequenziert. Die Sequenzierung der Proben sowie die Analyse der Sequenzdaten wird derzeit durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP7.1.2:

Die geochemischen und mikrobiellen Analysen der Mikrokosmos Studie werden bis Oktober abgeschlossen und ausgewertet. Des Weiteren werden einzelne Proben der Mikrokosmen getrocknet und mittels XRD in Greifswald analysiert, um mögliche Veränderungen des Bentonits durch die mikrobielle Aktivität zu identifizieren. Wie bereits erwähnt erhalten wir dann im September die ersten Proben von den mikrobiologischen Ansätzen der GRS, die hinsichtlich ihrer mikrobiellen Diversität näher untersucht werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

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.

Viollier E, Inglett P W, Hunter K, Roychoudhury A N, Van Capellen P (2000) The ferrozine method revisited : Fe(II)/Fe(III) determination in natural waters. *Applied Geochemistry* 15: 785-790.

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
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
- 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

- AP1: Die mineralogische Charakterisierung der Originalproben mit den jeweiligen Methoden (XRD, XRF, DTA/TG, CEC, TEM, FT-IR) ist planmäßig abgeschlossen.

- AP2: Die Beprobung und mineralogische Charakterisierung (XRD, RFA, FT-IR, TEM, KAK) eines vietnamesischen Bentonitvorkommens sind planmäßig abgeschlossen.
- AP3: Im Rahmen des vorgesehenen Auftrags an Jörn-Kasbohm-Consulting werden derzeit die Überkopf-Rotationsversuche an den VN-Proben durchgeführt. Parallel sind dort zusätzlich folgende Proben eingebunden: GMZ_Na, GMZ_Ca, GMZ_Zeolith (dankenswerter Weise bereitgestellt vom BGR, Dr. Stefan Kaufhold) und GMZ der Charge von 2015 (zur Verfügung gestellt von TU Lulea, Schweden). Auch diese Proben werden mineralogisch charakterisiert und in Hinblick auf das spezifische Lösungspotenzial getestet. Ergebnisse werden planmäßig Ende des Jahres erwartet.
- AP4: Vorversuche für die mineralogische Analyse zur Erfassung des Ausmaßes von Lösungsprozessen („smectite destabilized“) wurden im Rahmen einer Bachelorarbeit erstmalig an Saponit (IMV Nevada, USA) getestet. Die Probe wurde in Batchgefäßen mit der jeweiligen Lösung (Gipshut- bzw. Opalinustonlösung) versetzt und bei 25, 60 und 90 °C unter stetem Rühren für eine Dauer von 4 Wochen belassen. Untersucht wurden die mineralogischen Veränderungen mittels XRD und TEM. Dieser Vorversuch dient als erweiterter experimenteller Ansatz und soll im Laufe des Projektes auch auf die Bentonite angewendet werden.
- AP5: Die Überprüfung der EDX des TEM's mit Hilfe von Standardmineralen ist in der Durchführung. Als Referenz dienen RFA Daten der Standardminerale, um die Genauigkeit des Systems und deren Messparameter beurteilen zu können. Für eine bessere statistische Datengrundlage werden derzeit weitere RFA Analysen an den Standardmineralen durchgeführt. Bisher liegen wir 3 Monate hinter der Planung auf Grund der Kündigung eines Mitarbeiters und der Neueinstellung von Carolin Podlech. Die Ergebnisse werden Ende August erwartet.
- AP8: Konnte nicht beginnen, da die Experimente ca. 8 Monate im Verzug sind. Im Rahmen des Verwertungsplanes wurden die ersten Ergebnisse während des diesjährigen Gruppentreffens aller beteiligten UMB-Forschungsgruppen in Braunschweig und auf der internationalen Tagung der Clay Minerals Society in Atlanta (Posterbeitrag) vorgestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Die Charakterisierung der <2 µm Fraktion mittels TEM ist in der Vorbereitung.
- AP4: Die Vorversuche für die mineralogische Analytik werden erweitert und die bisherigen experimentellen Bedingungen verbessert. Zudem folgt eine Optimierung unserer Methode zur Bestimmung der KAK.
- AP5: Für die Prüfung von Black Hills Muscovite zur Eignung als Standardmineral am TEM werden erneut RFA Daten erhoben, um einen statistisch besseren Abgleich mit dem EDX des TEM's zu gewährleisten.
- AP8: Die mineralogische Charakterisierung der Reaktionsprodukte (Batch-Versuche 25 °C) wird voraussichtlich Ende 2016 erfolgen, 8 Monate später als zuerst geplant.
- Die Arbeitspakete zum Natürlichen Analogon (AP3, AP6, AP7) werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorhabensbeschreibung fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Podlech, C.; Grathoff, G.; Warr, L.N.; Kasbohm, J. (2016): The stability of bentonites and saponitic clays in aqueous solutions relevant to the underground sealing of radioactive waste deposits. Research Poster presented on the 53rd annual meeting of the Clay Minerals Society in Atlanta, DOI: 10.13140/RG.2.1.2190.0401

Zuwendungsempfänger: Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München	Förderkennzeichen: 02 E 11344D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt D	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 31.12.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 168.932,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krüger

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

Quantenmechanische Modellierung von Eisensubstitutionen im Kristallgitter und an den Oberflächen von Smektiten und Untersuchung des Einflusses auf die Mineraleigenschaften.

Bezug zu anderen Vorhaben:

Teilprojekt im Verbund „Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren“.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete:

- Charakterisierung von Referenzmineralen
- Eisensubstitutionen in Smektiten
- Eisensubstitutionen an Smektitoberflächen
- Eisenadsorption an Smektitoberflächen

Ziel der Arbeiten ist ein Beitrag zur Charakterisierung von Eisenionen in Montmorillonit und Beidellit sowie die Untersuchung der Verteilung dieser Ionen im Festkörper und an seinen Oberflächen als Beitrag zur Untersuchung der Mineraleigenschaften in Abhängigkeit vom Eisengehalt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Charakterisierung von Referenzmineralen; AP2: Eisensubstitutionen in Smektiten;

Die Untersuchung von Referenzmineralen (AP1) wurde für Montmorillonit und Nontronit zur Klärung offener Fragen fortgesetzt. Rechnungen zu Montmorillonit mit einem Wassermolekül in der Zwischenschicht zeigen, dass der bisher unterschätzte c-Vektor des Gitters hierdurch nicht alleine erklärt werden kann, sondern auch experimentelle Unsicherheiten wohl eine Rolle spielen. Für Nontronit wurden cis- und transvakante Strukturen sowie ferro- und antiferromagnetische Spinanordnungen verglichen. Das verwendete DFT+U-Verfahren beschreibt das Mineral korrekt als transvakant und antiferromagnetisch.

Untersuchungen zu Eigenschaften und Verteilung von oktaedrischen Fe^{3+} -Substitutionen in Tonmineralen (AP2) wurden zunächst für Pyrophyllit systematisch erweitert. Die Konzentration der Fe-Ionen wurde in Schritten von 1/8 bis zu Nontronit variiert um an diesem System die Wechselwirkung der Fe-Substitutionen in Abhängigkeit von Anordnung und Spinorientierung isoliert studieren zu können. Benachbarte Fe-Ionen stoßen sich geringfügig mit 2-6 kJ/mol ab, wobei antiparalleler Spin und OH-Verbrückung von Vorteil sind. Eine Wechselwirkung der Spins ist nur für benachbarte Substitutionen erkennbar. Für höhere Fe-Gehalte ist eine gleichmäßige Verteilung der Ionen sowie eine antiferromagnetische Spinanordnung bevorzugt. Der Austausch von oktaedrischem Al gegen Fe bei neutralem pH ist leicht endotherm und nahezu unabhängig von der Konzentration der Substitutionen.

Aufbauend auf diesen Befunden wurden bis zu 3 Eisensubstitutionen (Gehalt 3/8) in Modellmineralen für Montmorillonit und Beidellit mit einer Schichtladung von $-0.25 e$ betrachtet (AP2), wobei auch cis- und transvakante Kristallstrukturen als auch verschiedene Spinanordnungen berücksichtigt wurden. Für Montmorillonit sind Van-der-Waals-Korrekturen notwendig, um die cis-vakante Struktur als bevorzugt zu erhalten. Mit steigendem Fe-Gehalt $> 1/4$ wird jedoch die trans-vakante Struktur unabhängig von der Methode favorisiert. Fe wird von Mg-Substitutionen abgestoßen, außer diese Ionen sind benachbart und OH-verbrückt. Wie für Pyrophyllit sind generell Strukturen mit verteiltem Eisen und antiparallelem Spin bevorzugt. Für Beidellit zeigen die Rechnungen unabhängig vom Fe-Gehalt die transvakante Struktur als bevorzugt. Im Gegensatz zu Montmorillonit wirkt die tetraedrische Substitution im Beidellit eher attraktiv auf Fe. Für mehrere Fe-Substitutionen sind wieder eine Vermeidung von Paaren sowie eine antiferromagnetische Spinanordnung vorteilhaft. Für beide schichtgeladenen Mineralmodelle ist die Eisensubstitution im mittleren pH-Bereich leicht endotherm. Die bisherigen Modellierungen ergaben keine Hinweise auf Eisensegregation. Lediglich die Abstoßung von Fe- durch Mg-Ionen in der Oktaederschicht könnte die Segregation der Fe-Substitutionen bei ausreichend hohem Fe-Gehalt induzieren.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Charakterisierung von Referenzmineralen;
 AP2: Eisensubstitutionen in Smektiten;
 AP3: Eisensubstitutionen an Smektitoberflächen

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
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. Erstmals 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

Im ersten Halbjahr 2016 wurden Interviews in den Stakeholder-Gruppen „Energieversorger“, „Wissenschaft“, „Politik“, „Gewerkschaften“ und „Bürgerinitiativen“ durchgeführt und zu weiten Teilen ausgewertet.

Die Ergebnisse begründen unter anderem die spätere Wahl wesentlicher Variablen in der entscheidungstheoretischen Modellierung sowie der experimentellen Validierung. Zu diesem Zweck wurde das Modell formal beschrieben und das Experimentdesign auf einer JAVA-Plattform implementiert. Erste Tests und Durchführungen laufen in Juli und August 2016 an.

4. Geplante Weiterarbeiten

Mit Abschluss der ersten Interviewphasen werden die gesammelten Daten ausgewertet und die Ergebnisse zusammengefasst und gegenübergestellt. Diese werden zunächst in einem *Working Paper* zusammengeführt und zu gegebener Zeit veröffentlicht.

Darüber hinaus wird die theoretische Modellierung und die Bestimmung sog. „Treatments“ im experimentellen Arbeitsprogramm weiter in den Mittelpunkt rücken. Zudem werden ergänzende Interviews mit weiteren Vertretern der Stakeholder-Gruppe „Bürgerinitiativen“ durchgeführt sowie die abschließende Interviewphase zur Validierung der Ergebnisse im ersten Halbjahr 2017 vorbereitet.

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
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

Zur Ableitung denkbarer Entwicklungen der Lösungszusammensetzung in einem Endlager ist es wichtig, die Bandbreite möglicher Wirtsgesteinskompositionen in Betracht zu ziehen. Diese hängt naturgemäß vom noch festzulegenden Standort und der beabsichtigten Wirtsformation ab. Falls das Endlager im Steinsalz der Staßfurt- oder Werra-Folge errichtet werden sollte (z2HS bzw. z1Na), so kann auf chemische und mineralogische Analysen an gut untersuchten Standorten zurückgegriffen werden. Diese geben eine gewisse Bandbreite von Salzgesteinskompositionen wieder. Neben Halit und Anhydrit ist Polyhalit fast immer vorhanden. Weitere Minerale wie Kieserit, Carnallit oder Sylvin können in so kleinen Mengen auftreten, dass sie bei der mineralogischen Untersuchung leicht übersehen werden können. Die chemischen Analysen lassen sich aber häufig ohne sie nicht erklären. Hierbei ist zu beachten, dass es zu einer chemischen Analyse stets mehrere denkbare Mineralkombinationen gibt. Mit der folgenden Mineralkombination lassen sich die meisten vorliegenden Analysen formal erklären: Halit+ Anhydrit + Polyhalit (+ Kieserit oder Sylvin) (+ Carnallit)

Für die chemische Reaktion ist die Mineralkombination ohne Belang. Hier zählt nur die chemische Zusammensetzung. Die so abgeleiteten Bandbreiten dienen als Grundlage für weitere Überlegungen zur Lösungsentwicklung. Für norddeutsche Tonformationen ist der Wissensstand aufgrund unzureichender Daten aus Tiefbohrungen derzeit unbefriedigend.

Ein weiterer Teil des Projektes beschäftigt sich mit der Abschätzung von Pitzer-Wechselwirkungskoeffizienten für Spezieskombinationen, deren Untersuchung experimentell schwierig oder unmöglich ist. Hierzu wurde u. a. ein Verfahren entwickelt, um binäre Ionenwechselwirkungskoeffizienten für schwerlösliche Salze abzuleiten. Als Basis hierfür dienen Löslichkeitsversuche in Lösungen eines zweiten Salzes mit einem gemeinsamen Ion. Im Gegensatz zu früheren Ansätzen werden hierbei aber binäre und ternäre Wechselwirkungsparameter nicht gemeinsam bestimmt, sondern die ternären aus den binären abgeleitet. Hierdurch werden Parameter-Korrelationen vermieden, die unter Umständen zu extrem unrealistischen-Aktivitätskoeffizienten führen können. Das Verfahren wird derzeit an gut untersuchten Salzsystemen getestet und soll dann auf relevante Systeme mit Radionukliden übertragen werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortsetzung der Literaturstudie zu Lösungszusammensetzung tiefer Unterkreidetonformationen. Zusammenstellung von Daten zu potentiell auftretenden Lösungszusammensetzungen in Steinsalzlagerstätten. Beginn der Versuche zur Bestimmung der Löslichkeit von Spaltelementen in ausgewählten salinaren Lösungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11375A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Machbarkeitsuntersuchung zur Entwicklung einer Sicherheits- und Nachweismethodik für ein Endlager für Wärme entwickelnde Abfälle in einer Kristallingesteinsformation in Deutschland (CHRISTA), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.2, Wirtsgestein: Kristallin		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 107.692,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Zuge des Vorhabens soll die Übertragbarkeit der Sicherheitsanforderungen (BMU, 2010) für einen Sicherheitsnachweis in Kristallingestein geprüft werden. Das erfordert in erster Linie die Prüfung der Anwendbarkeit des sogenannten „ewG-Konzeptes“ für kristalline Gesteine. Inwieweit das „ewG-Konzept“ prinzipiell auf diesen Gesteinstyp übertragbar bzw. adaptierbar ist und wie dann eine Integritätsanforderung zu formulieren ist, soll geklärt werden. Hinsichtlich der Integritätsanalyse wird dazu die grundsätzliche Frage diskutiert, welche Bedeutung dem Integritätsbegriff für die Beschreibung der Barrierewirkung eines potenziell geklüfteten Gesteins zukommen kann und ob sich Kriterien für die Bewertung der Integrität daraus ableiten lassen.

Darüber hinaus soll geprüft werden, ob, und wenn ja, inwieweit bestehende Behälter-, Einlagerungs- und Verschlusskonzepte ausländischer Endlagerinstitutionen (speziell das KBS-3 Konzept der Schweden und Finnen) auf deutsche Verhältnisse übertragen bzw. angewendet werden könnten. Abschließend sollen die Grundlagen zur Entwicklung einer Nachweismethodik zusammengestellt werden. Dies bezieht sich auf die bisherigen Kenntnisse über die in Deutschland möglicherweise in Frage kommenden Kristallinvorkommen und den diesbezüglichen Informationsstand sowie auf die Anwendbarkeit der numerischen Werkzeuge für die Analyse der Integrität und der radiologischen Auswirkungen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagen für die Formulierung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes im Kristallingestein
- AP2: Prüfung der Übertragbarkeit des KBS-3-Konzeptes (Behälter, Einlagerungskonzept, Barrierenkonzept)
- AP3: Synthese bisheriger Untersuchungen im Kristallingestein
- AP4: Bewertung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden die durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse in einem Abschlussbericht dokumentiert. Will man kristalline Gesteine unter Anwendung des ewG-Konzeptes als potenzielle Wirtsgesteine mit in die Betrachtungen einbeziehen, wäre eine Erweiterung des ewG-Konzeptes eine mögliche Option. Diese Erweiterung könnte zum einen darin bestehen, dass ein kristallines Wirtsgestein von einem anderen Gestein umschlossen oder zumindest überdeckt wird, das von sich aus ein hohes Einschlussvermögen aufweist wie z. B. Tonstein oder Steinsalz. In diesem Fall würde der ewG sich auf diese Gesteine ausdehnen und nicht nur den kristallinen Bereich beinhalten. Zum anderen könnte eine Erweiterung auch darin bestehen, nicht nur einen ewG auszuweisen, sondern mehrere (multipler ewG). Anzahl und Größe dieser ewG-Komponenten würden dann bestimmt durch die Häufigkeit und Lage von hydraulisch wirksamen Störungszonen im Wirtsgestein. Die einzelnen ewG-Komponenten wären dann so anzuordnen, dass keine der hydraulisch wirksamen Störungszonen einzelne ewG-Komponenten durchlaufen. Es zeigte sich, dass für die beiden identifizierten ewG-Typen sich die in den Sicherheitsanforderungen spezifizierten Integritätskriterien prinzipiell anwenden lassen.

Bezüglich des Falles mit einer abdeckenden barrierewirksamen Gesteinsschicht zeigen die indikativen Modellierungsergebnisse, dass eine Ausdehnung der abdeckenden Schicht von einigen Kilometern bereits eine hinreichend isolierende Funktion erfüllt. Die Berechnungen zum Fall mit lokalem Einschluss (multipler ewG) haben ergeben, dass ein solcher bereits bei einer Stärke des kluffreien Gesteinskörpers von 1 m oder sogar weniger sehr effektiv funktionieren kann.

Der Typ multipler ewG erfordert eine entsprechend angepasste Erkundung des Standortes. Nicht zuletzt aus diesem Grund wurde der aktuelle Stand der Erkundungsmethoden für kristalline Gesteine im Rahmen des Vorhabens aufgearbeitet. Abgerundet wird die Untersuchung durch eine Analyse des von den Finnischen Kollegen (POSIVA) entwickelten Verfahrens zur Analyse der Gesteinseignung, dem sogenannten „Rock Suitability Classification“ (RSC). Es bietet sich an, ein solches Klassifizierungssystem auch auf deutsche Verhältnisse anzupassen, insbesondere, wenn es darum geht, Einlagerungsbohrlöcher und Streckenabdichtungen zu positionieren.

Alles in Allem kann festgestellt werden, dass prinzipiell auch in kristallinen Gesteinen ein Sicherheits- und Nachweiskonzept sowohl unter Anwendung des ewG-Gedankens als auch unter Anwendung der Integritätskriterien entwickelt werden könnte.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M., Becker, D.A., Hammer, J., Lommerzheim, A., Müller-Hoeppe, N., Nosek, U., Müller, C., Weber, J.R., Weitkamp, A. & Wolf, J. (2016). Projekt CHRISTA, Machbarkeitsuntersuchung zur Entwicklung einer Sicherheits- und Nachweismethodik für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland, Abschlussbericht, FKZ: 02E11375A/B, BGR, GRS, DBE TECHNOLOGY GmbH, Hannover, Braunschweig, Peine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11375B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Machbarkeitsuntersuchung zur Entwicklung einer Sicherheits- und Nachweismethodik für ein Endlager für Wärme entwickelnde Abfälle in einer Kristallingesteinsformation in Deutschland (CHRISTA), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.2, Wirtsgestein: Kristallin			
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 30.06.2016		Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 118.100,00 EUR		Projektleiter: Dr. Becker	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Aufgrund der Neuausrichtung der Suche nach einem Standort für ein Endlager für Wärme entwickelnde Abfälle kommen den Wirtsgesteinen Salz, Tonstein und Kristallin Bedeutung zu. Um einen objektiven Vergleich von Endlagersystemen in unterschiedlichen Wirtsgesteinen durchführen zu können, müssen entsprechende Grundlagen vorhanden sein. In den Sicherheitsanforderungen des BMU ist das sogenannte „ewG-Konzept“ verankert, das besagt, dass vom Antragsteller ein einschlusswirksamer Gebirgsbereich (ewG) ausgewiesen werden muss, der im Zusammenwirken mit den technischen Verschlüssen den Einschluss der Abfälle über den Nachweiszeitraum von 1 Million Jahren sicherstellt. Die Sicherheitsanforderungen schließen Kristallingesteine nicht explizit aus; trotzdem ist es offensichtlich, dass dieses Konzept auf die Wirtsgesteine Salz und Tonstein fokussiert ist. Die Integrität von Kristallingesteinen kann per se durch Kluftsysteme eingeschränkt sein. Inwieweit das „ewG-Konzept“ auf diesen Gesteinstyp übertragbar bzw. adaptierbar ist, ist derzeit nicht geklärt. Als erstes Teilziel des Vorhabens soll deshalb die Übertragbarkeit der Sicherheitsanforderungen auf ein mögliches Endlager im Kristallingestein geprüft werden. Als zweites Teilziel soll geprüft werden, inwieweit bestehende Endlagerkonzepte ausländischer Endlagerinstitutionen auf deutsche Verhältnisse übertragen bzw. angewendet werden können. Als drittes Teilziel sollen die Grundlagen zur Entwicklung einer Nachweismethodik zusammengestellt werden. Als viertes Teilziel soll geprüft werden, ob die verfügbaren numerischen Werkzeuge für die Analyse der Integrität und der radiologischen Auswirkungen eines Endlagersystems in einem geklüfteten Medium in Deutschland anwendbar und geeignet sind.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Arbeiten des Verbundprojekts sind in vier Arbeitspakete gegliedert:

AP1: Grundlagen für die Formulierung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes im Kristallingestein (Federführung GRS)

Task 1.1: Anwendbarkeit der Bedingungen aus den Sicherheitsanforderungen. Es ist zu klären, ob und wie das ewG-Konzept sinngemäß auf Kristallingestein übertragbar ist und welches die wesentlichen Elemente eines Sicherheitskonzeptes im Kristallingestein im Sinne der Sicherheitsanforderungen des BMU sind.

Task 1.2: Bedeutung des Integritätsbegriffs in potenziell geklüfteten Gesteinen. Es ist die grundsätzliche Frage zu diskutieren, welche Bedeutung dem Integritätsbegriff für die Beschreibung der Barrierewirkung eines potenziell geklüfteten Gesteins zukommen kann und welche Kriterien für die Bewertung der Integrität sich daraus ableiten lassen.

Task 1.3: Anwendbarkeit vorhandener Berechnungstools. Anhand von Beispielrechnungen ist zu prüfen, inwieweit die bisherigen Tools zur numerischen Berechnung und Bewertung sowohl der Integrität der geologischen, geotechnischen und technischen Barrieren als auch der radiologischen Konsequenzenanalyse anwendbar sind.

AP2: Prüfung der Übertragbarkeit des KBS-3-Konzeptes (Federführung DBETEC)

Task 2.1: Behälterkonzept. Es wird geprüft, inwieweit das KBS-3-Behälterkonzept vor dem Hintergrund des Deutschen Abfallinventars und der endzulagernden MOX-Brennstäbe angewendet werden kann.

Task 2.2: Einlagerungskonzept. Es wird qualitativ geprüft, inwieweit das KBS-3-Einlagerungskonzept vor dem Hintergrund des Deutschen Abfallinventars, des Raumbedarfs und der geologischen Gegebenheiten angewendet werden kann.

Task 2.3: Barrierenkonzept. Es wird qualitativ geprüft, inwieweit das KBS-3-Barrierenkonzept vor dem Hintergrund des Deutschen Abfallinventars und der geologischen Gegebenheiten angewendet werden kann.

AP3: Synthese bisheriger Untersuchungen im Kristallingestein (Federführung BGR)

Task 3.1: Zusammenfassung Kristallinvorkommen in Deutschland. Der Kenntnisstand zur Geologie der Kristallinvorkommen in Deutschland (GEISHA, Kristallin-Studie) wird so zusammengefasst, dass die Fragen im Arbeitspaket 1 (Task 1.1) bestmöglich geklärt werden können.

Task 3.2: Durchgeführte Standorterkundungs- und Forschungsarbeiten im Bereich Endlagersicherheit. Dieser Task hat zum Ziel, eine Synthese der bisherigen Untersuchungen der Verbundpartner im Kristallingestein zu bilden.

AP4: Bewertung und Dokumentation (Federführung DBETEC)

Task 4.1: Bewertung der Sicherheits- und Nachweisgrundlagen. In diesem Task soll diskutiert und bewertet werden, wie die Grundlagen zur Durchführung eines Projektes analog ISIBEL oder ANSICHT beschaffen sind und welche Erfolgsaussichten bestehen.

Task 4.2: Dokumentation der Ergebnisse.

GRS ist im Rahmen des hier dokumentierten Teilprojekts B an allen vier Arbeitspaketen beteiligt, der Schwerpunkt der Arbeiten liegt jedoch auf AP1.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Verbundprojekt wurden im Berichtszeitraum Arbeiten zu allen Arbeitspaketen durchgeführt. Die hier dargestellten Arbeiten der GRS lagen schwerpunktmäßig im Bereich des AP1.

Im Rahmen von Task 1.3 wurden zwei Modellrechenfälle erarbeitet. Diese orientieren sich an hypothetischen Konfigurationen der Typen Bb (großräumige Überdeckung mit einer barrierewirksamen Gesteinsschicht) und M (Aufteilung des Endlagers in mehrere, voneinander hydraulisch isolierte und jeweils für sich einschlusswirksame Teilbereiche). Als Datengrundlage wurde dabei auf die früher durchgeführte Studie SPA zurückgegriffen, bei der ein generisches Endlagerkonzept im Kristallin untersucht worden war. Jeder Modellrechenfall wurde mit einigen Parametervariationen gerechnet.

Die Ergebnisse legen die Schlussfolgerung nahe, dass beide Konzepte prinzipiell zu einem wirksamen Einschluss der Abfälle führen können, sofern die geologischen Bedingungen und die übrigen Gegebenheiten geeignet sind. Für eine abschließende Aussage zur Vereinbarkeit eines Endlagers im Kristallin mit dem (ggf. erweiterten) ewG-Konzept sind jedoch weitere, insbesondere auch probabilistische Modellrechnungen mit detaillierteren Modellen erforderlich.

Das bei der GRS verfügbare Instrumentarium – bestehend aus den Modulen CLAYPOS und GeoTREND-FRAME des Programmpakets RepoTREND – ist prinzipiell einsetzbar, jedoch hat sich gezeigt, dass bezüglich einiger Eigenschaften der Programme Anpassungs- oder Erweiterungsbedarf besteht.

Die Arbeiten wurden als Teil des Gesamtberichts dokumentiert.

Zu den Arbeitspaketen AP2 bis AP4 wurde durch Teilnahme an Diskussionen und kritische Durchsicht der Dokumentationen beigetragen. Im Übrigen wird bezüglich dieser Arbeitspakete auf die von den jeweils federführenden Organisationen zu erstellenden Halbjahresberichte verwiesen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Projekt wurde zum 30.06.2016 abgeschlossen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine	Förderkennzeichen: 02 E 11385
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung von Monitoring-Konzepten in Anlehnung an Sicherheits- und Nachweiskonzepte sowie Ableitung von Entscheidungsgrößen und Reaktionsoptionen (MONTANARA)	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und -technik, Feld 3.4, Wirtsgestein: unabhängig	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 30.06.2019	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 549.185,00 EUR	Projektleiter: Jobmann

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Zuge des Vorhabens soll zunächst die Entwicklung von Monitoring-Konzepten für Endlager in einer Tonformation in Deutschland verfolgt werden. Diese Monitoring-Konzepte soll entwickelt werden auf der Basis des Monitoring Workflows, der im Rahmen des internationalen MoDeRn-Projektes erarbeitet wurde. Ein Monitoring-Konzept soll so ausgerichtet sein, dass es möglich ist, im Zusammenspiel mit dem Einlagerungskonzept bzw. der zeitlichen Abfolge der Einlagerung, die Möglichkeiten und Grenzen einer Überwachung nach Verschluss des Endlagers noch während der Betriebsphase zu bewerten. In Ergänzung dazu werden in analogerer Weise auch die konzeptionellen Überlegungen zum Monitoring eines Endlagers in einer Steinsalzformation aus dem MoDeRn Projekt weiter entwickelt.

Ein weiteres Teilziel ist die Entwicklung von sogenannten „Trigger Values“. Das sind Werte von Messgrößen oder zeitliche Entwicklung von Messgrößen, die, wenn sie erreicht werden, darauf hindeuten, dass das Endlagersystem möglicherweise nicht mehr der erwarteten Entwicklung also dem „Referenzszenario“ entspricht. Abschließend sollen mögliche Handlungsoptionen bei Erreichen von „Trigger Values“ erarbeitet werden sowie eine Einschätzung bzgl. der Effektivität eines Monitorings nach Verschluss des Endlagers. Aktuelle Arbeiten und Ergebnisse des Vorhabens sollen auf entsprechenden internationalen Workshops präsentiert und diskutiert werden, um eine möglichst breite internationale Akzeptanz der Konzeptionen zu erzielen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Weiterentwicklung Monitoring-Konzept für Endlager im Steinsalz
- AP2: Neuentwicklung Monitoring-Konzepte für Endlager im Tonstein
- AP3: Erzeugung synthetischer Monitoring-Ergebnisse und Ableitung von „Trigger Values“ für einzelne Endlagerkomponenten
- AP4: Handlungsoptionen bei Erreichen von „Trigger Values“ und offene Fragen
- AP5: Dokumentation der Ergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Als eine Randbedingung für die Entwicklung von Monitoring-Konzepten wurde vorgesehen, die Endlagerkonzepte aus dem parallel laufenden Forschungsvorhaben ANSICHT zu verwenden, im Rahmen dessen ein Sicherheits- und Nachweiskonzept für ein Endlager in einer Tonformation in Deutschland entwickelt wird. Aus dem dortigen Endlagerstandortmodell NORD wird zunächst die Option vertikale Bohrlochlagerung verwendet. Das Endlager besteht aus insgesamt 45 Einlagerungsfeldern zuzüglich des Infrastrukturbereiches mit zwei Schächten. In jedem Einlagerungsfeld befinden sich 9 Einlagerungsstrecken mit jeweils 11 vertikalen Einlagerungsbohrungen. Gemäß dem Verfüll- und Verschlusskonzept wird nach Beladung eines Bohrloches dieses mit einem Bohrlochverschluss versiegelt und der Bereich der Einlagerungsstrecke über diesem Bohrloch mit Versatz verfüllt. Für ein so versiegeltes Bohrloch wurde im Berichtszeitraum ein dreidimensionales numerisches Modell entwickelt, das die thermo-hydro-mechanische Entwicklung des Bohrlochverschlusses simuliert. Dieses Modell befindet sich zurzeit in der Testphase. Die Ergebnisse der Modellierungen sollen genutzt werden, um gezielt Positionen für Sensoren auszuwählen, deren Messergebnisse geeignet wären, die Entwicklung des Verschlusses dahingehend zu bewerten, inwieweit der Verschluss anforderungsgemäß funktioniert.

Parallel dazu wurde der Entwurf eines sogenannten „Parameter-Screening“ Prozess getestet, der im Rahmen des MODERN2020 Projektes im Berichtszeitraum entwickelt wurde. Dieser Screening Prozess hat zum Ziel, diejenigen Parameter zu identifizieren, die geeignet sind, Informationen über die Entwicklung des Endlagers im Bereich von geotechnischen Barrieren zu liefern, um zu bewerten, ob die Barrieren ihrer angedachten Funktion nachkommen. Wenig aussagekräftige Parameter sollen damit identifiziert und ausgeschlossen werden. Getestet wurde der „Screening Prozess“ anhand eines Monitoring-Konzeptes, das für einen Schacht im Steinsalz im Rahmen eines früheren FuE-Vorhabens erarbeitet wurde. Es zeigte sich, dass der „Screening Prozess“ noch deutliche Schwächen aufweist. Diese ersten Testergebnisse wurden, zusammen mit den Tests anderer Partner, auf einem Monitoring-Workshop am 13.-16.06.2016 in Oakham, England vorgestellt und diskutiert. Auf diesem Workshop waren auch sogenannte „Public Stakeholder“ aus Belgien, Finnland und Schweden anwesend. Es wurde diskutiert, in welcher Form „Public Stakeholder“ ggf. frühzeitig in die Entwicklung von Monitoring-Programmen eingebunden werden sollten. Es wurden zwar keine Anforderungen seitens der „Public Stakeholder“ ad hoc formuliert, es wurde aber ihrerseits zum Ausdruck gebracht, dass sie erwarten, Vorschläge für Monitoring-Konzepte parallel zur Regulierungsbehörde vorgelegt zu bekommen. Damit hätten sie die Möglichkeit, sich an der Diskussion, ggf. unter Hinzuziehung externer Experten, zu beteiligen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Entwurf eines Monitoring-Konzeptes für ein ausgewähltes Einlagerungsbohrloch unter Anwendung des überarbeiteten „Parameter Screening Prozesses“.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11395
Vorhabensbezeichnung: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschiechten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und -technik, Feld 3.1, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 28.02.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 363.017,00 EUR	Projektleiter: Kühnlenz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, erstmalig ein technisches (standortunabhängiges) Konzept für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente auf der Grundlage generischer geologischer Modelle für flach lagernde Steinsalzformationen zu entwickeln. Dies schließt auch die Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein solches Endlager ein. Das erste Teilziel ist die Herleitung von generischen geologischen Modellen inklusive Modellparametern als Grundlage für die Gruben- gebäudekonzeption und Auslegungsberechnungen. Das zweite und dritte Teilziel sind die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes sowie die Entwicklung von technischen Konzepten für Endlagerbergwerke für vier verschiedene Einlagerungsvarianten. Das vierte Teilziel ist die Überprüfung der Ausweisbarkeit eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (Integritäts- und Konsequenzenanalyse für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in der flachen Lagerung). Insgesamt werden mit dem Vorhaben technisch-wissenschaftliche Grundlagen für eine sicherheitstechnische Bewertung von Endlagern in unterschiedlichen geologischen Formationen geschaffen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagenermittlung (DBE TEC)
- AP2: Erstellung von generischen geologischen Modellen, Ableitung von Modellparametern (BGR und IfG)
- AP3: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (GRS)
- AP4: Analyse der geomechanischen Integrität (BGR und IfG)
- AP5: Entwicklung von Endlagerkonzepten (DBE TEC)
- AP6: Analyse der radiologischen Konsequenzen (GRS)
- AP7: Bewertung der Betriebssicherheit (DBE TEC)
- AP8: Synthesebericht (DBE TEC)

Die BGR ist gemeinsam mit IfG federführend für die AP2 und AP4 zuständig und weiterhin am AP6 beteiligt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Auf der Grundlage des gemeinsam mit IfG im Rahmen von AP1 erarbeiteten Kenntnisstandes zur räumlichen Verbreitung der flach lagernden Steinsalzfolgen in Deutschland und zu ihrer lithologischen Zusammensetzung sowie zu den geologischen Lagerungsverhältnissen erfolgt die Erstellung von jeweils einem generischen geologischen 3D-Modell für den Typ „flache Lagerung“ und den Typ „Salzkissen“. Die Arbeiten am generischen geologischen 3D-Modell „flache Lagerung“ wurden im Berichtszeitraum abgeschlossen. Das 3D-Modell wurde an die DBE Technology übergeben und diente zur räumlichen Positionierung des Endlagers und für die thermischen Auslegungsrechnungen sowie für erste vorläufige thermomechanische Modellrechnungen von BGR und IfG. In Analogie zur Vorgehensweise bei diesem Modell wurde für den Typ „Salzkissen“ ein Referenzprofil mit einer typischen stratigraphischen Schichtenabfolge, ein generischer geologischer Schnitt sowie drei senkrecht dazu verlaufende geologische Schnitte erarbeitet, auf deren Grundlage das geologische 3D-Modell „Salzkissen“ konstruiert wird. Parallel zu den geologischen Modellierungsarbeiten erfolgte gemeinsam mit IfG die Zusammenstellung der für die numerischen Modellrechnungen zur Analyse der geomechanischen Integrität (AP4) benötigten Gesteinsparameter und Stoffgesetze in Form eines „Parameterberichtes“. Der Bericht befindet sich derzeit zur Durchsicht bei den Projektpartnern.

Der unter Federführung von DBETec gemeinsam mit allen beteiligten Projektpartnern erstellte fachliche Zwischenbericht wurde endgültig fertiggestellt und liegt dem Projektträger und dem BMWi vor.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fertigstellung des generischen geologischen 3D-Modells für den Typ „Salzkissen“,
- Abschluss der Arbeiten zur Zusammenstellung und Begründung der geologischen Randbedingungen und geomechanischen Modellparameter für die THM-Berechnungen,
- Fortführung der thermomechanischen Modellberechnungen für den Typ „flache Lagerung“ und den Typ „Salzkissen“,
- Kalibrierung der Berechnungsmodelle zur Integritätsanalyse an Versagensfällen geologischer Barrieren durch fluiddruck-getriebene Perkolation entlang diskreter Fließwege im Salzgestein.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Dörr, S., Filbert, W., Simo, E., Fahland, S., Hammer, J., Heusermann, S., Kühnlenz, T., Mrugalla, S., Reinhold, K., Buhmann, D., Kindlein, J., Mönig, J., Wolf, J., Minkley, W., Popp, T. (2015): Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes. Zwischenbericht, 105 S.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11405A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.2, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 28.02.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 550.199,00 EUR	Projektleiter: Bollingerfehr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, erstmalig ein technisches (standortunabhängiges) Konzept für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente auf der Grundlage generischer geologischer Modelle für flach lagernde Steinsalzformationen zu entwickeln. Dies soll auch die Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein solches Endlager einschließen. Das erste Teilziel ist die Herleitung von generischen geologischen Modellen inklusive Modellparametern als Grundlage für die Grubengebäudekonzeption und Auslegungsberechnungen. Das zweite und dritte Teilziel sind die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes sowie die Entwicklung von technischen Konzepten für Endlagerbergwerke für vier verschiedenen Einlagerungsvarianten. Das vierte Teilziel ist die Überprüfung der Ausweisbarkeit eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (Integritäts- und Konsequenzenanalyse für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in der flachen Lagerung). Insgesamt werden mit dem Vorhaben technisch-wissenschaftliche Grundlagen geschaffen für eine sicherheitstechnische Bewertung von Endlagersystemen in unterschiedlichen geologischen Formationen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagen ermitteln und zusammenstellen
- AP2: Erstellung von generischen geologischen Modellen, Ableitung von Modellparametern
- AP3: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes
- AP4: Analyse der geomechanischen Integrität
- AP5: Entwicklung von Endlagerkonzepten
- AP6: Analyse der radiologischen Konsequenzen
- AP7: Bewertung der Betriebssicherheit
- AP8: Synthesebericht

DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend zuständig für AP1, AP5, AP7 und AP8

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Mit der Drucklegung und dem Versand des gemeinsamen Zwischenberichtes von BGR, DBE TECHNOLOGY, GRS und IfG wurden die grundlegenden Arbeiten (AP1) vollständig abgeschlossen.

Die Planungen für die unterschiedlichen Endlagerkonzepte im AP5 (zwei unterschiedliche Einlagerungsvarianten für jeden der beiden betrachteten geologischen Typen „Salzkissen“ und "flache Lagerung") wurden weitergeführt. Auf Grundlage der relevanten Anforderungen (z. B. aus den "Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle" vom BMU aus 2010) wurde die Konzeptfindung für die Transport- und Einlagerungstechnik für die neue Einlagerungsvariante Horizontale Bohrlochlagerung abgeschlossen. Als Ergebnis wurde ein System konzipiert, das einen Transport von rückholbaren Kokillen (BSK-R) in abgeschirmten Transferbehältern nach unter Tage zum Einlagerungsbohrloch vorsieht. Am Bohrlochmund wird die BSK-R durch ein Schleusensystem mittels einer Schubkette und anschließend mit einem segmentierten Gestänge zentriert in das mit einem Liner vorher ausgestattete Bohrloch eingeführt.

Als Grundlage für die Grubengebäudeplanungen wurden thermische Berechnungen durchgeführt; zunächst für die Einlagerungsvariante Streckenlagerung von POLLUX®-Behältern und anschließend für die Einlagerung von BSK-R in horizontale Bohrlöcher. Grundlage dafür waren sowohl das generische geologische Modell seitens BGR als auch ein abgestimmter Parametersatz von BGR und IfG.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im kommenden Berichtszeitraum wird der Schwerpunkt der Arbeiten weiterhin im AP5 "Entwicklung von Endlagerkonzepten" liegen. Neben der Durchführung von thermischen Auslegungsberechnungen werden die Planungen der Grubengebäude für die Einlagerungsvarianten im Mittelpunkt stehen. Diese Planungsdaten (Geometrien und Temperaturverläufe) werden von den Partnern benötigt, um Integritätsanalysen anzustellen. Während bei der Variante Streckenlagerung von POLLUX®-Behältern auf Ergebnisse aus vorlaufenden Arbeiten zurückgegriffen werden kann, wird bei der Variante horizontale Bohrlochlagerung die neue Konzeption zugrunde gelegt. Weiterhin werden planerische Vorbereitungen getroffen für die Konzeptentwicklung der Einlagerungsvarianten in dem geologischen Typ "Salzkissen".

Darüber hinaus wird zum Ende des Berichtszeitraumes mit den Arbeiten zur Analyse der Betriebssicherheit begonnen. Dazu zählen zunächst die Zusammenstellung und Beschreibung von sicherheitsrelevanten Komponenten, Einrichtungen und Prozessen und eine Analyse von Betriebsabläufen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11405B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.2, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 28.02.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 525.090,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kindlein	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, ein technisches, standortunabhängiges Konzept für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente auf der Grundlage generischer geologischer Modelle für flach lagernde Steinsalzformationen zu entwickeln. Dies schließt auch die Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein solches Endlager sowie die Überprüfung und Anwendung der vorhandenen Instrumentarien für die Sicherheitsanalyse ein. Damit soll eine technisch-wissenschaftliche Grundlage geschaffen werden für eine sicherheitstechnische Bewertung von Endlagersystemen in unterschiedlichen geologischen Formationen.

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagen ermitteln und zusammenstellen
- AP2: Erstellung von generischen, geologischen Modellen, Ableitung von Modellparametern
- AP3: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes
- AP4: Analyse der geomechanischen Integrität
- AP5: Entwicklung von Endlagerkonzepten
- AP6: Analyse der radiologischen Konsequenzen
- AP7: Bewertung der Betriebssicherheit
- AP8: Synthesebericht

GRS ist federführend für die Arbeitspakete 3 und 6.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wurden im Berichtszeitraum insgesamt 4 Arbeitsgespräche mit den vier am Projekt beteiligten Organisationen (GRS, BGR, DBE TECHNOLOGY und IfG) durchgeführt. Die diskutierten Inhalte betrafen vor allem die Entwicklung der generischen geologischen Modelle, der Endlagerkonzepte sowie des Sicherheits- und Nachweiskonzeptes. Die Arbeiten in den Arbeitspaketen waren:

AP2: Diskussion von Aufbau und Detaillierungsgrad des generischen geologischen Modells (Typ flache Lagerung) sowie der erforderlichen geologischen Barrieremächtigkeiten. Zusammenstellung der erforderlichen Modellparameter.

AP3: Erarbeitung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager in flach lagernden Salzstrukturen.

Aufbauend auf den Grundzügen für ein Sicherheits- und Nachweiskonzept wurden die Sicherheits- und Nachweiskonzepte fortentwickelt. Im Sicherheitskonzept wurden die planerischen und technischen Maßnahmen für die Nachverschlussphase genauer beschrieben und Anforderungen an die geologische Barriere sowie die Endlagerauslegung formuliert.

Auf Grundlage der Sicherheitsanforderungen des BMUB sowie bestehender Nachweiskonzepte für Endlager in steil stehenden Salzformationen in Deutschland wurde ein Nachweiskonzept für ein Endlager in flacher Lagerung entwickelt. Es wurde beschrieben, wie der Erhalt des einschlusswirksamen Gebirgsbereiches im Nachweiszeitraum nachgewiesen und der sichere Einschluss der Radionuklide im ewG langzeitsicherheitlich bewertet werden können. Die Ergebnisse wurden in Fachgesprächen diskutiert und in einem Berichtsentwurf dokumentiert.

AP6: Vorbereitung von radiologischen Modellrechnungen, Diskussion der Rechenfälle.

Die Arbeiten zur radiologischen Konsequenzenanalyse wurden im Berichtszeitraum begonnen. Auf Grundlage bereits existierender FEP-Kataloge und Szenarienanalysen für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle im Wirtsgestein Salz wurden erste Überlegungen zur Ableitung von Rechenfällen vorgestellt. Vorhandene Indikatoren für eine vereinfachte radiologische Langzeitaussage wurden zusammengestellt und diskutiert. Es wurden erste, zunächst deterministische Testrechnungen mit dem von der GRS entwickelten Programmpaket RepoTREND durchgeführt und deren Ergebnisse ausgewertet.

Zu den Arbeitspaketen 4, 7 und 8 wurden im Berichtszeitraum keine Arbeiten durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP3: Dokumentation des Sicherheits- und Nachweiskonzeptes in einem Bericht.

AP4: Diskussion der geomechanischen Modellrechnungen und der Modellergebnisse.

AP6: Durchführung von radiologischen Modellrechnungen, Diskussion der Ergebnisse.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 11405C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschiechten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und -technik, Feld 3.1, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 28.02.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 599.728,00 EUR	Projektleiter: Dr. Minkley	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, erstmalig ein technisches (standortunabhängiges) Konzept sowie die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente auf der Grundlage generischer geologischer Modelle für flach lagernde Steinsalzformationen zu entwickeln. Das erste Teilziel ist die Herleitung von generischen geologischen Modellen inklusive Modellparametern als Grundlage für die Grubengebäudekonzeption und Auslegungsberechnungen. Ein zweites Teilziel ist die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes sowie die Entwicklung von technischen Konzepten für Endlagerbergwerke für vier verschiedenen Einlagerungsvarianten. Ein weiteres Ziel ist die Überprüfung der Ausweisbarkeit eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (Integritäts- und Konsequenzenanalyse für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in der flachen Lagerung). Insgesamt werden mit dem Vorhaben technisch-wissenschaftliche Grundlagen geschaffen für eine sicherheitstechnische Bewertung von Endlagersystemen in unterschiedlichen geologischen Formationen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagen ermitteln und zusammenstellen
- AP2: Erstellung von generischen geologischen Modellen, Ableitung von Modellparametern
- AP3: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes
- AP4: Analyse der geomechanischen Integrität
- AP5: Entwicklung von Endlagerkonzepten
- AP6: Analyse der radiologischen Konsequenzen
- AP7: Bewertung der Betriebssicherheit
- AP8: Synthesebericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen von AP2 erfolgte eine Zusammenstellung und Begründung der geologischen Randbedingungen und geomechanischen Modellparameter für die numerischen Modellrechnungen. Die Randbedingungen umfassen u. a.:

- Gebirgstemperatur und Gebirgsspannungszustand vor Beginn der Einlagerung;
- Thermische Materialeigenschaften der angenommenen Homogenbereiche bezüglich Wärmeleitfähigkeiten und spezifischen Wärmekapazitäten;
- Mechanische Materialeigenschaften der angenommenen Homogenbereiche bezüglich Elastizität, stationärem Kriechen (Kriechklassen), Dilatanzgrenze, Bruchgrenze sowie post-failure-Verhalten;
- Nachweis der hydraulischen Dichtheit der Wirtsgesteine sowie der Auswirkungen möglicher Schädigungsprozesse.

Da es sich bei der zu untersuchenden Situation um einen generischen Standort „Flache Lagerung“ handelt, gibt es keine konkreten standortspezifischen Datensätze von petrophysikalischen und geomechanischen Parametern, sondern die Festlegung der Datenbasis erfolgt auf Grundlage der Zusammenstellung repräsentativer Datensätze von verschiedenen Standorten.

Als Dokumentation des erreichten Arbeitsstandes wurde gemeinsam mit der BGR ein interner Zwischenbericht erarbeitet, der nach Bedarf fortgeschrieben wird.

4. Geplante Weiterarbeiten

In den folgenden Monaten werden planmäßig die Arbeiten an den generischen Modellen weitergeführt, wobei der Schwerpunkt auf AP4 mit der Integritätsanalyse der geologischen Barriere des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs (ewG) liegt. Sie ist ein wesentliches Element der Sicherheitsanalyse für Endlager für radioaktive Abfälle. Grundlage bildet das generische Modell des Standorts „Flache Lagerung“, wovon ausgehend repräsentative Schnitte festgelegt werden. Unter Berücksichtigung der verschiedenen Einlagerungsvarianten (u. a. Bohrloch-, Streckenlagerung) werden vom IfG als erster Schritt zweidimensionale Endlagermodelle betrachtet. Dabei werden explizit Grubenbaue des Endlagerbergwerks, also Erkundungs-, Richt- und Einlagerungsstrecken berücksichtigt und mit hoher Detaillierung abgebildet.

Parallel dazu findet gemeinsam mit der BGR in AP2 die Ausarbeitung der geologischen Rahmenbedingungen für den Typ „Salzkissen“ statt.

Als 2. Schritt ist die Kalibrierung der Berechnungsmodelle zur Integritätsanalyse an Versagensfällen geologischer Barrieren durch fluiddruck-getriebene Perkolation entlang diskreter Fließwege im Salzgestein vorgesehen. Dies ist Voraussetzung für die Durchführung von THM-gekoppelten Modellrechnungen zur Überprüfung der Integrität der geologischen und geotechnischen Barrieren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

BGR (2016). Unter Beteiligung von BGR: S. Fahland, J. Hammer, S. Heusermann, T. Kühnlenz, S. Mrugalla, K. Reinhold, E. Völkner, Liu, W.; IfG: W. Minkley, T. Popp. Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA). - Zwischenbericht Zusammenstellung der Materialparameter für THM-Modellberechnungen

Zuwendungsempfänger: Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 11415A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 431.000,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Reich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die geochemische Wechselwirkung der Actiniden Np, Pu und des Spaltproduktes Tc mit Zementkorrosionsphasen sowie die Vorgänge an der Grenzfläche zwischen Beton und natürlichem Tongestein bzw. Bentonit werden bei mittleren und hohen Ionenstärken untersucht. Bei den Studien mit Pu wird auch der Einfluss organischer Zusätze auf dessen Sorption an Zementphasen betrachtet. Der Schwerpunkt der Studien soll bei den drei- und vierwertigen Actiniden und beim vierwertigen Technetium liegen. Teilweise sollen aber auch Np(V) und Tc(VII) zum Vergleich mit in die Untersuchungen einbezogen werden. Zur Identifizierung der wichtigsten Prozesse bei der Radionuklidrückhaltung sollen die Sorptions- und Diffusionsexperimente mit Speziationsmethoden (XAFS, XRD, XPS, CE-ICP-MS) gekoppelt werden. Diese Daten sollen es ermöglichen, die wichtigsten Prozesse wie Sorption und Diffusion zu modellieren und auf molekularer Ebene zu verstehen, so dass Vorhersagen im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse gemacht werden können. Im Rahmen des Verbundprojekts wird schwerpunktmäßig mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, dem Karlsruher Institut für Technologie, der Universität des Saarlandes und der TU München zusammengearbeitet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Untersuchung des Einflusses von Zementalterationsphasen auf die Migration von Np, Pu und Tc in Portlandzement
- Einfluss von organischen Zementadditiven auf die Sorption von Plutonium an Zementphasen
- Untersuchung der Diffusion von Np, Pu und Tc in Tongestein unter hyperalkalinen Bedingungen
- Untersuchung der Sorption von Pu und Tc an Ca-Bentonit und ihrer Diffusion in kompaktiertem Ca-Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Sorption von 8×10^{-6} M Np(V) an Ca-Bentonit ($< 63 \mu\text{m}$) wurde in Batchversuchen in Abhängigkeit des Fest-flüssig-Verhältnisses ($S/L = 0,5-15 \text{ g/L}$, $\text{pH } 10$) und des pH -Wertes ($\text{pH} = 8-13$, $S/L = 2 \text{ g/L}$) in verdünnter Gipschlösung (VGL) unter Ar-Atmosphäre studiert. Dabei wurde bei $\text{pH } 10$ ab einem S/L -Verhältnis von $2,5 \text{ g/L}$ ein konstanter $\log(K_d)$ -Wert von $3,1 \pm 0,2 \text{ L/kg}$ gemessen. Mit zunehmendem pH -Wert steigt die Sorption von Np(V) und ist ab $\text{pH} \geq 10,5$ quantitativ ($\geq 99,0\%$, $\log(K_d) = 5,1 \pm 0,4 \text{ L/kg}$). Weiterhin wurde die Sorption von Np(IV), Np(V) und Np(VI) an Ca-Bentonit ($S/L = 2 \text{ g/L}$) bei einer kleineren Konzentration von 1×10^{-8} M Np im pH -Bereich von 8-13 in VGL unter Ar-Atmosphäre untersucht. Np(IV) und Np(VI) zeigten über den gesamten pH -Bereich eine starke Sorption mit $\log(K_d)$ -Werten von $5,2 \pm 0,3 \text{ L/kg}$ bzw. $4,7 \pm 0,3 \text{ L/kg}$. Das Sorptionsverhalten von Np(V) war ähnlich wie bei 8×10^{-6} M Np(V).

Weiterhin wurde die Sorption von 8×10^{-6} M Np(V) an Portlandit in einer mit Ca(OH)_2 gesättigten VGL bei $\text{pH } 12,3$ unter Ar-Atmosphäre untersucht. Dabei wurden für alle S/L -Verhältnisse ($0,25-1 \text{ g/L}$) eine Sorption von über $99,5 \%$ und ein konstanter $\log(K_d)$ -Wert von $4,8 \pm 0,3 \text{ L/kg}$ festgestellt.

Bei Batchversuchen mit Zementsteinpulver ($< 63 \mu\text{m}$, $w/z = 0,5$) und VGL unter Ar-Atmosphäre wurde ebenfalls eine nahezu vollständige Rückhaltung von Np(V) beobachtet. Bei den Experimenten mit 8×10^{-6} M Np(V) und $\text{pH } 10$ wurde das S/L -Verhältnis von $0,5-15 \text{ g/L}$ variiert. Bei einer Konzentration von 1×10^{-8} M Np(V) wurde eine pH -Kurve von 9-13 aufgenommen. Die gemessenen $\log(K_d)$ -Werte für Np lagen im Bereich von $4,3$ ($\text{pH } 9$) bis $5,6$ ($\text{pH } 13,3$).

Für die Untersuchung der Sorption von Th(IV) und Np(V) an Zementkorrosionsphasen wurden CSH-Phasen mit Ca:Si-Verhältnissen (C:S) von $0,75$, $1,07$ und $1,65$ synthetisiert. Bei den anschließenden Batchexperimenten bei $\text{pH } 10$ mit 1×10^{-8} M Th(IV) und 8×10^{-6} M Np(V) unter Ar-Atmosphäre in MilliQ-Wasser war die Sorption nahezu quantitativ mit $\log(K_d) \geq 5,0$; unabhängig vom C:S- und S/L -Verhältnis ($0,5-15 \text{ g/L}$).

Eine Zementsteinprobe ($w/z = 0,5$, Dicke = $10,8 \text{ mm}$, $\varnothing = 24,8 \text{ mm}$) wurde in eine Diffusionszelle mit VGL als mobile Phase eingebaut. Zur Charakterisierung der Probe wurden zunächst die Diffusionsparameter von HTO in Zementstein ermittelt: $D_e = (9,8 \pm 0,5) \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ und $\varepsilon = 0,59 \pm 0,03$. Anschließend wurde ein Diffusionsversuch mit 8×10^{-6} M Tc(VII) gestartet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Batchexperimente zur Sorption von drei- und vierwertigen Actiniden an Ca-Bentonit, Zementstein und CSH-Phasen
- Weitere Diffusionsexperimente mit Zementstein ($w/z = 0,5$ und $0,7$) und kompaktiertem Ca-Bentonit

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11415B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 638.860,00 EUR	Projektleiter: Dr. Schmeide	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens sind Beiträge zur Verbesserung des Verständnisses dominierender Prozesse für die Mobilisierung bzw. Immobilisierung von Radionukliden auf molekularer Ebene sowie die Bestimmung quantitativer Parameter zur geochemischen Radionuklidrückhaltung an endlagerrelevanten Festphasen. Im Detail wird das Rückhaltevermögen von Zementphasen und Tonmaterialien gegenüber Radionukliden (Cm, Eu, U, Tc) unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken mittels Batch- und Diffusionsexperimenten untersucht. Durch Einsatz spektroskopischer Methoden sollen gebildete Oberflächenkomplexe bzw. der strukturelle Einbau der Radionuklide in die Mineralphasen auf molekularer Ebene spezifiziert und über längere Zeiträume verfolgt werden, um eine mögliche Freisetzung von Radionukliden infolge von veränderten Umgebungsparametern aufzuzeigen. Ein weiteres Ziel besteht in der Bereitstellung verbesserter Bewertungsgrundlagen zum Einfluss polymerer Zementfließmittel (Superplasticizer) auf das Adsorptionsverhalten von Radionukliden im Freisetzungsfall. Am Beispiel von Polycarboxylatethern (PCE) als aktuelle Generation von Superplasticizern sollen die Bedingungen für eine verringerte adsorptive Immobilisierung von Actiniden-Analoga an Zementphasen und Tonmaterialien festgestellt werden. 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

- AP1: Spektroskopische Untersuchung der Stabilität von Radionuklid-dotierten Zementphasen (Cm, U und Tc)
- AP2: Spektroskopische Untersuchung der Stabilität von Radionuklid-dotierten Tonmineralphasen (Cm, U und Tc)
- AP3: Untersuchung der Sorption und Diffusion von U an/in Tongestein und Ca-Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen
- AP4: Untersuchung der Komplexbildung von Eu mit polymeren Zementfließmitteln (Polycarboxylatether)
- AP5: Synthese und Charakterisierung ¹⁴C-markierter Polycarboxylatether
- AP6: Untersuchung des Einflusses polymerer Zementfließmittel (Polycarboxylatether) auf die Adsorption von Eu an Zementphasen
- AP7: Untersuchung des Einflusses polymerer Zementfließmittel (Polycarboxylatether) auf die Adsorption von Eu an Tongestein und Ca-Bentonit
- AP8: Entwicklung geochemischer Modelle
- AP9: Methodenentwicklung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Die Komplexbildung von Eu(III) (Actinid-Analogon) mit einem kommerziellen Zementfließmittel auf PCE-Basis (MasterGlenium 51, BASF) wurde in konzentrationsabhängigen Messungen mittels Ultrafiltration und ^{152}Eu als Radiotracer quantitativ erfasst. Eine Parametrisierung erfolgte für pH 5.8 auf der Grundlage der Langmuir-Gleichung und des Ladungsneutralisationsmodells. Hierzu wurde der Carboxylgruppengehalt durch direkte Titration bestimmt. Weiterhin wurden erste Untersuchungen zum Einfluss der Elektrolyte NaCl und CaCl_2 in Konz. bis 4 M vorgenommen, sowohl in Bezug auf die Komplexbildung als auch auf deren Auswirkung auf das Adsorptionsverhalten von Eu(III) an Ca-Bentonit. Aussagen zum Mobilisierungspotential der Zementadditive lassen sich erst nach weiteren systematischen Studien unter alkalischen Bedingungen treffen.
- Es wurden CSH-Phasen mit Ca:Si-Verhältnissen von 1.0, 1.6, 2.0 mit 30 – 50 $\mu\text{g/g}$ U(VI) hergestellt und mit TRLFS, MIR, PXRD, ICP-MS und Elementaranalyse charakterisiert. Der Einbau von U(VI) in die CSH-Phasen wurde bestätigt. In Leaching-Versuchen wurden die CSH-Phasen einer 2.5 M NaCl Lösung für 762 h ausgesetzt. Das Leaching von U(VI) aus CSH-Phasen erzeugte in der Leaching-Lösung eine maximale U-Konzentration von 8 bis 12 $\mu\text{g/L}$ innerhalb 36 h, die nach 36 h stabil zwischen 0.01 und 1 $\mu\text{g/L}$ blieb. Die berechnete maximale Löslichkeit unter den Leaching-Bedingungen beträgt 33 $\mu\text{g/L}$. Nach Einstellung des stationären Gleichgewichtes für Uran in der Leaching-Lösung verblieben 99.7 % bis 99.8 % des gesamten Urans in den CSH-Phasen. In MIR-Spektren konnte keine Veränderung der CSH-Phasen über einen Zeitraum von 762 h beobachtet werden. Die Leaching-Versuche deuten auf einen Einbau von NaCl in die CSH-Phasen hin, der nach 36 h abgeschlossen ist und keinen Einfluss für die Langzeitstabilität zu haben scheint.
- Die Sorption von U(VI) an Ca-Bentonit in verdünnter Gipschlösung wurde mittels Batch-Experimenten untersucht. Durch Variation von Versuchsparametern, wurde deren Einfluss auf die Sorption bestimmt. Dazu zählen das fest-flüssig-Verhältnis (2 – 20 g/L), die Sorptionszeit (Sorptionsskinetik), die Uran-Konzentration (Sorptionisotherme, 1×10^{-9} – 1×10^{-4} mol/L bei pH 8) und der pH-Wert (pH 8 – 13 bei $c_{\text{U}} = 1 \times 10^{-6}$ mol/L). Alle Versuche wurden sowohl unter aeroben als auch unter anaeroben Bedingungen (N_2 -Atmosphäre) durchgeführt. Aus den Sorptionsisothermen abgeleitete $\log(K_d)$ -Werte liegen bei 2.2 [$\log(\text{L/kg})$] ($p\text{CO}_2 = 10^{-3.5}$ atm) bzw. 3.0 [$\log(\text{L/kg})$] (N_2 -Atmosphäre).

4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung der Komplexbildung von ^{152}Eu Eu(III) mit PCE und deren Adsorption an Ca-Bentonit, Tongestein und amorphen CSH-Phasen bei Variation von pH-Wert (9 – 13) und Ionenstärke (bis 4 M NaCl und CaCl_2) unter Ausschluss von CO_2 .
- Untersuchung der Veränderung der CSH-Phasen über den Leaching-Zeitraum mit PXRD. Synthese von neuen CSH-Phasen mit kleinen Ca:Si-Verhältnissen (0.3, 0.6). Anwendung weiterer Leaching-Lösungen (z. B. Carbonat-haltige Lösungen).
- Weiterführende U(VI)-Sorptionsexperimente unter hyperalkalinen Bedingungen im Modellsystem NaCl bzw. in einem synthetischen Zementporenwasser. Aufklärung der Uran-Speziation in Lösung sowie Identifizierung gebildeter Oberflächenkomplexe mittels spektroskopischer Methoden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Poetsch, M., Lippold, H.: Effects of ionic strength and fulvic acid on the adsorption of Tb^{3+} and Eu^{3+} onto clay. J. Contam. Hydrol. 192, 146-151 (2016).

Becker, M., Lippold, H.: Complexation and adsorption of ^{152}Eu Eu(III) to superplasticizers and bentonite at variable salt concentrations. Posterbeitrag: 2nd Petrus-OPERA PhD and Early-Stage Researchers Conference on Radioactive Waste Management and Disposal, 27.06.-01.07.2016, Delft, Niederlande

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11415C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 559.679,00 EUR	Projektleiter: Dr. Marquardt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Forschungs- und Entwicklungs-Aktivitäten (FuE) dieses Vorhaben beinhalten die anwendungsbezogene, standortunabhängige Grundlagenforschung auf dem Gebiet der Entsorgung insbesondere Wärme entwickelnder und langlebiger radioaktiver Abfälle. In diesem Vorhaben werden sicherheitsrelevante Phänomene und Prozesse untersucht, prozessbeschreibende Modelle und Codes entwickelt und bereitgestellt sowie die Methodik zur Führung von Sicherheitsnachweisen optimiert. Die FuE-Arbeiten haben zum Ziel, die wissenschaftlich-technischen Grundlagen zur Realisierung eines Endlagers für radioaktive Abfälle bereitzustellen, den Stand von Wissenschaft und Technik ständig weiterzuentwickeln sowie zum Aufbau, Weiterentwicklung und Erhalt der wissenschaftlich-technischen Kompetenz und Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung in Deutschland beizutragen. Das Vorhaben liefert standortunabhängige Ergebnisse aus Untersuchungen zum geochemischen Verhalten von Actiniden in Lösungen - Grundwässer bzw. Porenwässer -, die im Kontakt mit Betonbauwerken stehen. Hierbei werden für die relevanten Actiniden thermodynamische Daten zur Komplexierung – vorwiegend gelöste organischen Komponenten (Plasticizer) - und Sorptionsdaten auf Basis von Oberflächenkomplexierungsmodellen abgeleitet. Diese Daten können über einem thermodynamischen Modell in eine Sicherheitsanalyse eines Endlagers Eingang finden.

Zusammenarbeiten laufen mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, der Universitäten Mainz, Potsdam, Heidelberg, Köln, des Saarlandes sowie der TU München.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Radionuklidrückhaltung im System Zement-, Zementkorrosionsprodukten bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- AP2: Radionuklid-Rückhaltung durch Sorption am Tonmineral Illit bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- AP3: Thermodynamische Modellierung:
- AP4: Methodenentwicklung: Analytik, Spektroskopie, Quantenchemie

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Eine Übersicht über Pitzer-Parameter für Radionuklid-Organik-Systeme, die in der Literatur verfügbar sind, wurde zusammengestellt. Hierbei wurde der Focus auf Th(VI), Np(V) und U(VI) sowie auf Liganden und funktionelle Gruppen gelegt, die als Zementadditive in Frage kommen.

Folgende Liganden sind als relevante Zementadditive definiert worden oder dienen als Modellliganden mit relevanten funktionellen Gruppen dieser Additive: Melamin, Phtalat, Citrat, Adipat, Methylacrylat, 1,2-Ethandiol und Gluconat.

C-S-H-Phasen mit verschiedenen Ca:Si-Verhältnissen tragen signifikant zur Aufnahme der in der aktuellen Studie untersuchten Radionuklide bei. Ein Bericht über die Synthese dieser Festphasen gemäß der Syntheseroute des PSI-LES (Schweiz) wurde dem Projektkonsortium durch KIT-INE zur Verfügung gestellt.

Im Rahmen des AP1 des GRaZ-Projektes ist geplant, die Löslichkeit von Th(IV), Np(V) und U(VI) in NaCl-, CaCl₂- und MgCl₂-Lösungen in Anwesenheit organischer Zementadditive bzw. potentieller Abbauprodukte zu untersuchen. Um herauszufinden, welche Additive einen signifikanten Einfluss auf die Löslichkeit haben, werden zunächst „Screeningexperimente“ durchgeführt. Als organische Additive werden hierbei die oben aufgeführten Liganden verwendet. Mit diesen Liganden wurden Stammlösungen mit einer Elektrolytkonzentration von 2,5 M (NaCl) und 1 M (CaCl₂ und MgCl₂) hergestellt. Die Löslichkeitsexperimente werden jeweils bei pH 9 und 13 (NaCl), pH 9 und 12 (CaCl₂) sowie pH 9 (MgCl₂) durchgeführt. Bisher wurden sämtliche Proben für die Experimente mit Th(IV) und U(VI) vorbereitet. Als Bodenkörper werden Th(OH)₄(am) sowie Na₂U₂O₇·H₂O(cr) (NaCl-System), CaU₂O₇·3H₂O(cr) (CaCl₂-System) und UO₃·2H₂O(cr) (MgCl₂-System) verwendet. UO₃·2H₂O(cr) musste zunächst synthetisiert werden, die endgültige Charakterisierung dieser Festphase steht noch aus. Sobald dies abgeschlossen ist, erfolgt die Zugabe der jeweiligen Bodenkörper zu den Proben. Im Fall der Th(IV)-Proben wurde Th(OH)₄(am) bereits zugegeben, die erste Probennahme wird in den kommenden Wochen stattfinden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Nachdem die Gleichgewichtsbedingungen in der Lösung – konstanter pH-Wert und konstante Actinid-Konzentrationen – erreicht wurden, werden die Th(IV)- und U(VI)- Systeme beprobt.
- Festphasen-Charakterisierung nach Beendigung der “Screening-Löslichkeitsversuche”.
- Ausarbeitung von ausgedehnten Löslichkeitsversuche für die relevantesten Th(IV)- und U(VI)-Systeme basierend auf den Ergebnissen aus den “Screening-Löslichkeitsversuchen”.
- Ausarbeitung von “Screening-Experimenten” für Np(V)-Systeme.
- Die Sorptionsexperimente von Eu(III) am Illit bei einem CO₂-Partialdruck von 1 % werden beendet und auf einige Kontrollexperimente bei 10 % CO₂-Atmosphäre ausgeweitet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarbrücken		Förderkennzeichen: 02 E 11415D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 458.021,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kickelbick	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zu Beginn des Projektes werden Korrosionsprodukte von Zementstein bzw. auch von ausgewählten Betonproben inklusive der organischen Zementzusätze unter den Bedingungen eines Standorts in Tongestein unter hochsalinaren Bedingungen untersucht. Insbesondere wird Portlandzement (PZ Doppel N CEM I 42,5 N) ohne bzw. mit typischen organischen Zementzusätzen (beispielsweise Glenium 51) studiert werden. Dabei wird untersucht, welche Formationswässer sich im Kontakt mit mittleren bis hohen Salinitäten ausbilden und welche Korrosionsprodukte unter solchen Bedingungen entstehen. Zu diesen Arbeiten gehören die Charakterisierung der hyperalkalinen Porenwässer inklusive der enthaltenen organischen Komponenten sowie die Herstellung entsprechender synthetischer Formationswässer.

Als weiteren Schwerpunkt werden Untersuchungen zu den Wechselwirkungen solcher hochalkaliner Wässer mit den verwendeten Tönen durchgeführt. Hierzu werden Opalinuston sowie Ca-Bentonit (Calcigel), der als Puffer-Material und Bohrlochverschluss im Endlagerkonzept vorgesehen ist, eingesetzt. Ziel der Untersuchungen ist die Bestimmung der Rückhaltung bzw. Mobilität endlagerrelevanter Elemente (bzw. Elementgemische in einer dem Endlagerinventar entsprechenden Zusammensetzung) im Ton unter dem Einfluss der gebildeten hyperalkalinen Formationswässer hoher Ionenstärke mit Hilfe von Batch-Versuchen und Miniatur-Säulen-Experimenten (MSE).

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

UdS-AP I (Verbund AP1 und AP4):

Untersuchung der Zusammensetzung von Zementporenwasser (CPW) mittels Auslaugversuchen, Definition und Herstellung von synthetischem Zementporenwasser (ACW) für weitere Untersuchungen

UdS-AP II (Verbund AP2 und AP4)

Untersuchung der Wechselwirkung von ACW mit Ton (Batch-Versuche mit Opalinuston und Calcigel), Analyse des Korrosionsprozesses von Ton durch hoch-pH und ACW

UdS-AP III (Verbund AP2)

Untersuchung der Sorption von endlagerrelevanten Elementen an unverändertem und verändertem Ton („aged clay“) in Anwesenheit von ACW (Batch-Versuche)

UdS-AP IV (Verbund AP2 und AP4)

Wechselwirkung von CPW bzw. ACW mit Ton bzw. Tongemischen (OPA, Ca-Bentonit) mittels Miniatur-Säulen-Experimenten (MSE)

UdS-AP V (Verbund AP1 und AP4)

Untersuchung des Einflusses organischer Additive im Eluat aus Korrosionsprozessen auf die Retardation bzw. Mobilisierung von endlagerrelevanten Metallen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden die Auslaugversuche am Beton größtenteils abgeschlossen. Langzeitexperimente um die Änderung des Zementporenwassers über die Zeit zu überprüfen laufen noch. Zudem wurde ein synthetisches Porenwasser bei hoher Ionenstärke (ACW) definiert, mit dem in Zukunft Auslaugversuche und Sorptionsuntersuchungen an den verschiedenen Tonen (Opalinuston, Calcigel) durchgeführt werden. Zum Ansetzen des ACW wird mit Argon entgastetes Milli-Q Wasser verwendet. In etwa 900 mL MilliQ Wasser werden 143,6 g (2,46 mol) NaCl, 2835 mg (20,0 mmol) Natriumsulfat, 380 mg (5,1 mmol) KCl und 15,5 mg (0,06 mmol) $\text{SrCl}_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$ gelöst. Durch Zugabe von 1 mL 30%iger Natronlauge wird der pH-Wert ins alkalische Milieu gebracht und dann 4769 mg (32,4 mmol) $\text{CaCl}_2 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ darin gelöst. Eisen, Aluminium und Barium werden jeweils in dieser Reihenfolge als 1 g L^{-1} AAS Standardlösung zugegeben. Von der Eisenlösung werden 469 μL (0,008 mmol), von der Aluminiumlösung 108 μL (0,004 mmol) und von der Bariumlösung 687 μL (0,005 mol) zugegeben. Danach wird noch 1 mL 30 %ige NaOH in 100 μL Schritten zugegeben um den pH-Wert Schritt für Schritt auf $12 \pm 0,1$ zu erhöhen. Am Ende wird die Lösung im Messkolben auf 1 L aufgefüllt.

Die Untersuchungen zu den Wechselwirkungen zwischen dem ACW und den beiden Tonen (OPA und Calcigel) laufen noch. Dabei konnten bereits Auslaugversuche der Tone mit dem ACW durchgeführt werden. Es wurden Opalinuston und Calcigel in zwei verschiedene Fest-Flüssigverhältnissen (4 g L^{-1} und 40 g L^{-1}) und bei zwei Temperaturen ($23 \pm 2 \text{ }^\circ\text{C}$ und $70 \pm 2 \text{ }^\circ\text{C}$) ausgelaugt. Untersuchungen zu den Unterschieden in der Phasenzusammensetzung der ausgelaugten und der unbehandelten Tonproben wurden mittels XRD begonnen, sind aber noch nicht abgeschlossen.

In Vorbereitung der Sorptionsexperimente endlagerrelevanter Elementgemische (U, Eu, Cs und I) an den Tonen wird eine Methode entwickelt, um diese mittels ICP-MS in einem Schritt unter identischen Bedingungen zu quantifizieren, da normalerweise der Gehalt an I unter basischen Bedingungen, diejenigen an U, Eu und Cs jedoch im sauren pH-Bereich bestimmt wird, wodurch pro Probe zwei Messungen nötig wären. Außerdem wurde im Berichtszeitraum mit den Optimierungen der HPLC-ICP-MS-Kopplung zur Durchführung der MSE bei hohen Salzgehalten begonnen. Im bisherigen Modus würde während der MSE-Kopplung eine viel zu große Salzfracht mit dem Eluent in die ICP-MS geraten. Als Abhilfe wird ein *split flow* Ansatz genutzt, der nur einen Teil des Eluates zur ICP-MS leitet und den Rest verwirft. Der für die MSE etablierte PFA-Zerstäuber mit zyklonischer Zerstäuberkammer kann jedoch mit dem geringen Fluss nach dem Split kein stabiles Aerosol erzeugen, weshalb hierfür nun ein *total consumption* Zerstäuber erfolgreich zum Einsatz kommt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Berichtszeitraum sollen die Untersuchungen zu den Arbeitspaketen 1 und 2 vollständig abgeschlossen werden. Dazu zählt die Validierung des hergestellten ACW in vergleichender Untersuchung mit dem ausgelaugten Zementporenwasser anhand von Sorptionstests mittels Batch- und MSE-Versuchen und die Herstellung von Alterierten Tonproben für nachfolgende Sorptionsuntersuchungen.

Die Methode zur Quantifizierung von Iod für die simultane ICP-MS-Bestimmung von U, Eu, Cs und I in hochsalinaren Lösungen wird weiterentwickelt und nach Validierung in den anstehenden Sorptionsexperimenten eingesetzt werden.

Im Rahmen der HPLC-ICP-MS-Kopplung soll die abschließende Optimierung des *split flow* mit dem *total consumption* Zerstäuber bis zum nächsten Halbjahresbericht abgeschlossen sein.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Meiser D. (2016) Charakterisierung von Zementalterationsphasen als Bestandteil der geotechnischen Barriere eines potentiellen Endlagers für hochradioaktive Abfälle. Wissenschaftlich Arbeit im Rahmen des Lehramt Studiengangs, NTF III, Universität des Saarlandes.

Hein C., Sander J.M., Kautenburger R. (2016) New Approach of a transient ICP-MS measurement method for samples with high salinity, *Talanta*, in press (doi: 10.1016/j.talanta.2016.06.059).

Zuwendungsempfänger: Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		Förderkennzeichen: 02 E 11415E
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt E		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 476.760,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krüger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

- Quantenmechanische Modellierung der Sorption von Actiniden an C-S-H-Phasen
- Quantenmechanische Modellierung der Komplexbildung von Actiniden in basischen Lösungen

Bezug zu anderen Vorhaben:

Teilprojekt im Verbund „Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen“ GraZ

Komplementär zum BMBF-Verbundprojekt ThermAC

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

AP1: Wechselwirkung von Actiniden mit C-S-H-Phasen

AP2: Actinidenkomplexe in basischen Lösungen

AP3: Unterstützung spektroskopischer Experimente

AP1 umfasst quantenmechanische Berechnungen periodischer Modelle von C-S-H-Phasen und die Untersuchungen der Wechselwirkung von Actinidenspezies mit diesen.

In AP2 werden Hydroxid- und Carbonatkomplexe von Actiniden in basischer wässriger Lösung sowie ihre Wechselwirkung mit Lösungskationen und Modellen von Zementadditiven untersucht.

AP3 ist der Unterstützung der Interpretation spektroskopischer Experimente im Verbund durch die Berechnung entsprechender Parameter gewidmet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1: C-S-H-Phasen; AP1.3: Sorption an C-S-H-Phasen; AP2.1: Hydroxide und Carbonate. Die Modellierung von C-S-H-Phasen anhand von Tobermorit als Modellmineral (AP1.1) wurde fortgeführt. Strukturen von verschiedenen Varianten von 14 Å- und 11 Å-Tobermoriten (Merlino- und Hamid-Typ) wurden mit der DFT-GGA-Methode für C/S-

Verhältnisse zwischen 0.67 und 1 auch für sehr ähnliche Varianten gut reproduziert. Energiebetrachtungen zeigen wie erwartet, dass ein niedriges C/S-Verhältnis unter neutralen Bedingungen leicht und im sauren Bereich stark bevorzugt ist. Neben idealen Kristallstrukturen wurden Defekte in 14 Å-Tobermorit betrachtet, um zu realitätsnahen weniger geordneten Modellen zu kommen. Der Austausch von verbrückendem Si^{4+} durch Al^{3+} sowie die Fehlstelle eines verbrückenden Si-Tetraeders erwiesen sich als leicht endotherm und wenig abhängig von der Defektdichte. Der Austausch von verbrückendem Si^{4+} durch Ca^{2+} ist dagegen stark endotherm und damit weniger wahrscheinlich. Der Vergleich von Defektenergien für verschiedene C/S-Verhältnisse legt nahe, dass für ein geringeres C/S-Verhältnis Defekte wahrscheinlicher sind. Auf der Basis der bisherigen Substratmodelle wird derzeit damit begonnen, den Einbau von U(VI) in C-S-H-Phasen zu modellieren (AP1.3).

Modellierungen zur Hydrolyse von U(VI) und Am(III) unter insbesondere basischen Bedingungen (AP2.1) wurden fortgeführt. Für U(VI) wurden vor allem dreikernige Komplexe des Typs $[(\text{UO}_2)_3(\text{OH})_n]^{(6-n)+}$ für $n = 3-6$ untersucht. Dabei wurden Ringstrukturen mit und ohne zentrale O- und OH-Gruppen mit linearen Strukturen für verschiedene Verbrückungen verglichen. In Übereinstimmung mit bisherigen Ergebnissen zu $[(\text{UO}_2)_3(\text{OH})_5]^+$ sind zentral oxoverbrückte Strukturen bevorzugt, jedoch lineare Geometrien für die Ladungen 0 und +3 ebenso stabil. Zentral OH-verbrückte Spezies sowie solche ohne zentrale Verbrückung sind weniger stabil. Da Spezies mit 4- und 5-fach koordinierten Uranylionen sehr ähnliche Energien zeigen, dürfte die Koordinationszahl in diesen Komplexen dynamisch sein. Dieser Aspekt sowie die Stabilität der bisher optimierten Strukturen wird derzeit exemplarisch mit dynamischen Simulationen untersucht. Der Vergleich der Stabilität trimerer Komplexe mit Mono- und Dimeren bestätigt bisherige Vorstellungen zur Speziation. Trimere mit einer Ladung von +3 sind nicht stabil gegenüber kleineren Komplexen. Trimere existieren nur für niedrigere Gesamtladungen. Diese Arbeiten werden derzeit auf anionische Spezies erweitert.

Modellierungen zur Am(III)-Hydrolyse wurden fortgesetzt (AP2.1). Als Grenzkomplex der einfachen Hydroxide kann $[\text{Am}(\text{OH})_6]^{3-}$ angenommen werden, da dieser Komplex noch eine schwache Bindung des sechsten OH-Liganden zeigt. Als alternative zu Hydroxiden wurden Oxo-Komplexe in Analogie zur bekannten Spezies $[\text{UO}_2\text{O}(\text{OH})_3]^{3-}$ modelliert. Bisherige Ergebnisse zeigen, dass gegenüber anionischen Hydroxiden $[\text{Am}(\text{OH})_n]^{(3-n)}$, $n = 4-6$, die entsprechenden Oxospezies $[\text{AmO}(\text{OH})_n]^{(1-n)}$, $n = 2-4$, bevorzugt sind, während $[\text{AmO}]^+$ weniger stabil als $[\text{Am}(\text{OH})_2]^+$ ist. Ein wesentlicher Aspekt der Stabilität anionischer Oxokomplexe ist wohl die Verringerung der wechselseitigen Ligandenabstoßung durch Koordinationserniedrigung. Neben der bisher fehlenden neutralen Hydroxospezies werden derzeit mögliche dimere Spezies untersucht. Erste Ergebnisse mit einem einfachen Modell ohne explizite Wasserliganden zeigen, dass ein kationischer Dimerkomplex möglich ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.1: C-S-H-Phasen; AP1.2: Oberflächen von C-S-H-Phasen; AP1.3: Sorption an C-S-H-Phasen; AP2.1: Hydroxide und Carbonate.

5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch, Uranyl Adsorption at Clay Minerals, in High Performance Computing in Science and Engineering 2016, S. Wagner, A. Bode, H. Brühle, M. Brehm (Hrsg.), Bayerische Akademie der Wissenschaften, 2016, S. 177.

Zuwendungsempfänger: Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 11415F
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt F		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 339.580,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kumke	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Universität Potsdam (Physikalische Chemie) wird Laser-basierte optische Verfahren zur Bearbeitung der im Verbund definierten Arbeitspakete AP1 – AP4 einsetzen bzw. (weiter)entwickeln. Ziel der durchgeführten Arbeiten ist die Entwicklung analytischer, optischer Methoden zur Verbesserung des molekularen Prozessverständnisses der Wechselwirkung von Actinoid-Ionen (bzw. Lanthanoid-Ionen als Analoga) mit Mineralphasen, wie Bentonit, Tongestein und Zementalterationsphasen. Mit Hilfe moderner, ortsauflösender Schwingungsspektroskopie werden komplementär die interessierenden Wechselwirkungen zusätzlich aus Sicht der Mineralphase(n) beschrieben. Das Vorhaben wird in einem Verbundprojekt gemeinsam mit der Universität Mainz, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, dem Karlsruher Institut für Technologie, der Universität des Saarlandes, der TU München, der TU Dresden sowie der Universität Heidelberg durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Radionuklid-Rückhaltung an Zementalterationsphasen (mittlere bis hohe Ionenstärken):
Speziation von Eu(III) an/auf CSH-Phasen mittels:
- zeitaufgelöster Laserspektroskopie (TRLFS)
- Schwingungsspektroskopie/-mikroskopie
- AP2: Radionuklid-Rückhaltung an Tongestein (hyperalkalin, mittlere bis hohe Ionenstärke):
- TRLFS, Raman-Mikroskopie und SFG-Spektroskopie zur Untersuchung von Opalinuston- bzw. Calcium-Bentonit-Oberflächen
- Speziationsuntersuchungen von Eu(III) bei hohen pH-Werten und Ionenstärken in Lösung
- AP4: Methodenentwicklung:
- Weiterentwicklung optischer Mikroskopie-Techniken zur Untersuchung von Mineraloberflächen im Zusammenhang mit der Sorption von Lanthanoiden

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die für die Arbeiten zum Arbeitspaket AP1 hergestellten CSH-Phasen wurden getrocknet und mit verschiedenen analytischen Methoden (SEM, Raman, IR, XRD, ICP-OES, TGA und Elementaranalyse) charakterisiert. Die Untersuchungen ergaben, dass weder die Standzeit/ Schüttelzeit ($14 \text{ d} \leq t \leq 28 \text{ d}$) der CSH-Suspensionen noch das Feststoff-Wasser-Verhältnis ($5 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1} \leq s/l \leq 20 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$) oder das Schütteln bzw. Stehenlassen der CSH-Suspensionen die CSH-Struktur beeinflussen. Die Variation des C/S-Verhältnisses lieferte verschiedene CSH-Strukturen. Die hergestellten CSH-Phasen konnten den Strukturen von 14 \AA Tobermorit ($C/S = 0,7$) und CSH I ($C/S = 1,3$) zugeordnet werden.

Die Ergebnisse der TRFLS der CSH-Phasen 14 \AA Tobermorit und CSH I, welchen Europium(III) (Eu(III)) bereits während der Herstellung als „Intraphasen-Lumineszenz-sonde“ beigefügt wurde, wiesen auf drei verschiedene Eu(III)-Spezies hin. In beiden CSH-Phasen waren zudem die gebildeten Eu(III)-Spezies aufgrund der unterschiedlichen strukturellen Mikroumgebung verschieden. Mit der lumineszenzspektroskopischen Analyse des pH-Werteinflusses ($10 \leq \text{pH} \leq 13$) und der Kontaktzeit auf die Ab-/Adsorption von Eu(III) (Zugabe nach erfolgter CSH-Phasenbildung) an die CSH-Phase CSH I wurde begonnen.

Weiterhin wurde die Untersuchung der Wechselwirkungen von Eu(III) mit Calcium-Bentonit bei pH-Werten > 9 angefangen. Hierfür wurde ein Hintergrundelektrolyt von $2,5 \text{ mol L}^{-1}$ Natriumchlorid verwendet. Eu(III) wurde in Konzentrationen von $10^{-6} \text{ mol L}^{-1}$ bis $10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$ bei pH-Werten von 10 bzw. 12 mit Calcium-Bentonit in Inertgasatmosphäre aufgeschlämmt. Für zehn Tage konnten Eu(III) und Calcium-Bentonit in den Suspensionen bei pH-Wert-Nachführung interagieren. Schließlich wurden Feststoff und Überstand getrennt. Die Feststoffe wurden bei Raumtemperatur lumineszenzspektroskopisch untersucht. Hierzu wurde die Eu(III)-Lumineszenz direkt über den ${}^5\text{L}_6 \leftarrow {}^7\text{F}_0$ -Übergang angeregt und die Lumineszenz spektral- und zeitaufgelöst detektiert. Zusätzlich wurde die Speziation des Eu(III) über den ${}^5\text{D}_0 \leftarrow {}^7\text{F}_0$ -Übergang zwischen 577 nm und 581 nm zunächst bei Raumtemperatur geprüft. Hier zeigt die selektive Anregung das Vorhandensein verschiedener lumineszierender Eu(III)-Spezies.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die lumineszenz- und schwingungsspektroskopischen Untersuchungen des Sorptionsprozesses von Eu(III) an CSH-Phasen (14 \AA Tobermorit und CSH I) in Abhängigkeit vom pH-Wert sollen fortgesetzt werden. Die Variation der Temperatur ($4 \text{ K}, 293 \text{ K} \leq T \leq 353 \text{ K}$) und der Ionenstärke ($1 \text{ M} \leq I \leq 4 \text{ M}$, NaCl) sollen die nächsten zu untersuchenden Einflussparameter sein.

Mögliche Leitverbindungen für Zementzusatzstoffe auf Polynaphthalenbasis wurden identifiziert und die Untersuchung der Wechselwirkung mit Lanthanoiden wird begonnen. Neben der TRFLS wird auch die Transientenabsorptionsspektroskopie eingesetzt werden. Hiermit kann „aus Sicht“ der organischen Liganden die Bildung von Eu(III)-Komplexen beobachtet werden, was einen komplementären Ansatz darstellt und helfen sollte, Aussagen zur Eu(III)-Speziation zu treffen.

Die Lumineszenzspektroskopie der Eu(III)-Calcium-Bentonit-Feststoffe wird bei ultratiefen Temperaturen fortgeführt, da hieraus bessere Aussagen zur Eu(III)-Spezies-Verteilung abgeleitet werden können. Weiterhin werden die Feststoffe Untersuchungsgegenstand schwingungsspektroskopischer Methoden sein.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Manuskripte sind in Vorbereitung.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden	Förderkennzeichen: 02 E 11415G
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt G	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Ton	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 239.258,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Stumpf

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Projekt befasst sich mit Arbeiten zum grundlegenden Prozessverständnis der Speziation von (dreiwertigen) Actiniden/Lanthaniden (An/Ln) in chemischen Medien, die sich aus Zementdegradationsprozessen ergeben sowie die Bedingungen potentieller deutscher Wirtsgesteine berücksichtigen, d. h. es werden alkaline Lösungen mit mittleren bis hohen Ionenstärken betrachtet. Es werden folgende Vorhabensziele definiert: a) Identifizierung relevanter organischer Zementadditive (Plastifizierer und Super-plastifizierer, in enger Zusammenarbeit mit den Verbundpartnern), b) Bestimmung konsistenter thermodynamischer Datensätze zur Wechselwirkung der relevanten organischen Zementadditive mit redoxstabilen An/Ln in alkalinen Lösungen, c) Charakterisierung des Einflusses additivhaltiger CSH-Zementphasen auf die Actinidenspeziation, d) Erweiterung des bisherigen Wissenstandes zur Wechselwirkung von An/Ln mit Boratspezies in alkalinen Lösungen inklusive der Identifizierung von borathaltigen Sekundärphasen, e) Machbarkeitsstudie zur Sorptionskalorimetrie von Ln an endlagerelevanten festen Phasen zur direkten Ermittlung von Sorptionsenthalpien

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

TU-AP-1.1: Thermodynamische Untersuchungen im System Ac/Ln-organische Zementzusatzstoffe in alkalinen Lösungen und künstlichen Zementporenwasser mit folgenden Schwerpunkten: Herstellung/Charakterisierung definierter CSH-Mineralphasen und Ettringit mit ausgewählten relevanten Additiven, Batchversuche zur Freisetzung und/oder Sorption von Additiven im binären System Zementadditiv-CSH-Mineralphase, spektroskopische und thermodynamische Charakterisierung löslicher Komplexspezies im binären System Actinid-Zementadditiv/Modellligand

TU-AP-1.2: Untersuchungen im System Actinid-Borat-organische Zementadditive in alkalinen Lösungen mit folgenden Schwerpunkten: thermodyn. Charakterisierung der Wechselwirkung von Boraten mit Zementadditiv auf Polyolbasis (Boratesterbildung, $\text{pH} > 7$), spektroskopische und thermodynamische Charakterisierung der Wechselwirkung von Ln/An mit den Boratestern

TU-AP-4.1: Etablierung der isothermen Titrationskalorimetrie zur Bestimmung von Sorptionsenthalpien folgenden Schwerpunkten: Machbarkeitsstudie zur Sorptionskalorimetrie von Ln(III) mit Modellphasen (z. B. TiO_2) als Funktion der Ionenstärke, Anpassung/Entwicklung entsprechender der Auswerterroutinen an die Spezifika der Sorption, sorptionskalorimetrische Untersuchungen mit Ln(III) an endlagerrelevanten Phasen (Ton, CSH-Phasen) als f(pH, I, Medium)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TU-AP-1.1:

Zur Untersuchung des Neodym(III)-Malat-Systems (Malat = Zementadditiv+Modellverbindung) wurden verschiedene UV/Vis-Messungen durchgeführt, z. B. Ligandtitrationen bei pH 4 und 5,7 und pH-Reihen mit [Mal] = 0,02 M bzw. 0,01 M. Dabei konnten zwei Komplexe $[\text{NdMalH}]^{2+}$ und $[\text{NdMal}]^+$ identifiziert und entsprechende Stabilitätskonstanten von $\log\beta_{111}=7,23\pm 0,27$ und $\log\beta_{110} = 3,77 \pm 0,12$ bestimmt werden. Der in der Literatur beschriebene Komplex $[\text{NdMal}_2\text{H}_2]^+$ [Sukhno2004] konnte nicht bestätigt werden, wobei jedoch in einer Reihe von Messungen vermutlich der Komplex $[\text{NdMal}_2\text{H}]$ auftrat. In allen UV/Vis-Messungen wurde eine Konzentration von $1\cdot 10^{-3}$ M Nd eingesetzt, um komplementäre Messungen zu den geplanten EXAFS-Messungen zu erhalten. EXAFS-Messungen im System Nd-Malat wurden in Kooperation mit der Uni Heidelberg (D. Fröhlich) an der BESSY II (Berlin) durchgeführt.

Fluoreszenzmessungen zur Komplexierung von Europium(III) mit Malat wurden bei verschiedenen pH-Werten durchgeführt und mittels Faktoranalyse (PARAFAC) ausgewertet. Dabei konnte ein 1:1- und ein 1:2-Komplex identifiziert werden mit $\log\beta_{110} = 4,20 \pm 0,04$ und $\log\beta_{120} = 7,28 \pm 0,08$. Mittels PARAFAC konnte außerdem der 1:3-Komplex mit $\log\beta_{130}=8,81\pm 0,01$ bestimmt werden. Cm(III)- und Eu(III)-Fluoreszenzmessungen mit Malat im basischen Medium wurden ebenfalls durchgeführt. Die Auswertung dieser Messungen gestaltet sich jedoch schwierig, da Wandsorption und die Hydrolyse des Metalls eine große Rolle einnehmen und bisher nicht-identifizierbare Spezies auftreten. Die Lebenszeiten der reinen Metall-Hydrolysespezies stimmen nicht mit Literaturwerten überein.

Mit der Präparation amorpher CSH-Phasen mit verschiedenen Ca:Si-Verhältnissen für Adsorptionversuche mit Zementadditiven und deren Charakterisierung mittels Ramanspektroskopie wurde begonnen.

TU-AP-4.1:

Mit der Entwicklung eines Matlab-Codes zum Einlesen und Auswertung von titrationskalorimetrischen Daten wurde begonnen. Hierzu wurde die Umsetzung der Datenmodellierung für Systeme mit einer Art von Bindungsstellen (1:1 Komplexe) implementiert und am Ca-EDTA-System getestet. Mit der Erweiterung auf Systeme mit bis zu 4 unterschiedlichen Bindungsstellen wurde begonnen. Dabei wurde in einem ersten Schritt die Bestimmung von Komplexbildungskonstanten und ΔH für vorgegebene Stöchiometrien eingearbeitet. Zur Ermittlung der freien Konzentration der Reaktionspartner wurde der Newton-Raphson-Algorithmus genutzt. Modelle für unabhängige Komplexierung an jeweiligen Bindungsstellen sowie sequenzielle Bindung wurden implementiert und befinden sich derzeit in der Testphase.

4. Geplante Weiterarbeiten

- pH-abhängige EXAFS-Messungen am System Am(III)-Malat/Succinat Ende Juli 2016 in Grenoble
- Abschluss der Untersuchungen zur Speziation im An(III)/Ln(III)-Malatsystem (bis in basischen pH-Bereich), Durchführung ergänzender spektroskopischer Untersuchungen mittels FTIR, Tieftemperatur-TRLFS
- Fortsetzung der Arbeiten zur Herstellung/Charakterisierung definierter CSH-Phasen + additivhaltiger CHS-Phasen (radiomarkiertes Additiv bzw. Modellligand), Batchversuche mit den CHS-Phasen zur Auslaugung des Additiv
- Fortsetzung der Arbeiten zur Entwicklung eines Matlab-Codes zur Auswertung titrationskalorimetrischen Daten, Anwendung auf Sorptionskalorimetrie

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg		Förderkennzeichen: 02 E 11415H
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt H		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 352.934,00 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 Zementalterationsphasen und organischen Zementzusätzen. Die Arbeiten dieses Teilprojektes beschäftigen sich daher mit dem Einfluss diverser Plasticizer und Superplasticizer, die in der Herstellung von Zementen zum Einsatz kommen und im Laufe der Lagerzeit freigesetzt werden können, auf den Quellterm und die Komplexierung von trivalenten Actiniden im Temperaturbereich bis 90 °C. Ergänzt werden diese Untersuchungen durch Arbeiten zur Wechselwirkung mit verschiedenen Modellliganden wie Malonat, Succinat etc. 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 Langzeitsicherheitsanalyse 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, Universität des Saarlandes sowie der TU-München.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Einfluss von organischen Zementadditiven auf den Quellterm von trivalenten Actiniden.
- AP2: Komplexierung von dreiwertigen Actiniden mit organischen Zementadditiven.
- AP3: Weiterentwicklung von spektroskopischen Methoden zur Anwendung auf saline Systeme unter zementrelevanten Bedingungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Aus den spektroskopischen Daten, die zur Komplexierung von Eu(III) mit dem kommerziellen Superplasticizer Glenium51 aufgenommen wurden, konnten erstmals temperaturabhängige konditionale Stabilitätskonstanten ($\log \beta'(T)$) in 0.1 mol/kg NaCl Lösung unter Verwendung des Ladungsneutralisationsmodells ermittelt werden. $\log \beta'(T)$ zeigt einen geringfügigen Anstieg von 7.5 auf 7.9 (β in kg/moleq) mit steigender Temperatur (20 - 90 °C), d. h. die Komplexierungsreaktion ist leicht endotherm und entropiegetrieben ($\Delta rH^{\prime}m$ & $\Delta rS^{\prime}m > 0$). Die bestimmten $\log \beta'$ Werte sind dabei kleiner als der vom HZDR bei Raumtemperatur bestimmte Wert (9.9), wobei die Stabilitätskonstanten mit einer relativ großen Unsicherheit von ca. 1 log-Einheit behaftet sind.

Erste Laserspektroskopische Untersuchungen zur Komplexierung von Cm(III) mit Methylmethacrylat wurden durchgeführt. Wie auch für andere carboxylische Liganden (z. B. Acetat, Propionat) wurden drei Komplexspezies ($[CmMethn]^{3-n}$, $n = 1-3$) nachgewiesen. Im nächsten Schritt erfolgt die Bestimmung thermodynamischer Daten aus der Analyse der experimentellen Daten.

Erste EXAFS spektroskopische Untersuchungen zur Wechselwirkung dreiwertiger Lanthanide mit dem Superplasticizer Glenium51 wurden an der KMC-2 Beamline (BESSY II, Berlin) durchgeführt. Die Daten befinden sich noch in der Auswertung, jedoch gibt es bereits Hinweise darauf, dass für einige Proben wesentliche Strukturdaten der gebildeten Komplexe extrahiert werden können.

Bezüglich der Untersuchungen zum Einfluss zementorganischer Modellliganden (Phthalat, Citrat, Adipat, Na-Methylacrylat, 1,2-Ethandiol und Melamin) auf die Löslichkeit von Nd(III) in NaCl-, CaCl₂- und MgCl₂-Lösung wurden bereits erste Datenpunkte erhalten, die Experimente befinden sich jedoch noch in einem zu frühen Stadium um endgültige Schlüsse zu ziehen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Laserspektroskopische Untersuchungen der Komplexierung von Cm(III) mit weiteren Modellliganden.
- EXAFS-spektroskopische Untersuchungen der Am(III)-Malonatkomplexe – ESRF (Februar 2017).
- Fortführung und Auswertung der Batchexperimente zur Bestimmung des Einflusses der zementorganischen Modellliganden auf die Löslichkeit von Nd(III).
- Unterstützung der TU Dresden bei EXAFS-Untersuchungen zur Komplexierung dreiwertiger Actiniden mit Malat und Succinat.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Fröhlich, D.R., Trumm, M., Skerencak-Frech, A., Panak, P.J.: Thermodynamics of Cm(III) complexation with succinate studied by time-resolved laser fluorescence spectroscopy and quantum chemical calculations, *Inorg. Chem.*, 2016, 55, 4504-4511.

Skerencak-Frech, A., Wernicke, P., Trumm, M., Fröhlich, D.R., Finck, N., Panak, P.J.: The complexation of Cm(III) and Am(III) by malonate at increased temperatures studied by TRLFSS, EXAFS and quantumchemical calculations, in preparation.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolf-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11425
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Bautechnische Realisierung Technikumsprüfstand mit Durchführung und Auswertung erster Versuche (Salzschnittblöcke)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und -technik, Feld 3.3, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2015 bis 31.07.2018	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.241.071,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Düsterloh	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Bautechnische Realisierung eines im Vorhaben FKZ 02E11223 ausgelegten Technikumsprüfstandes und Durchführung und Auswertung erster Versuche zur Eignung von Abdichtungselementen aus Steinsalzschnittblöcken mit Fugenfüllung zur langzeitsicheren Abdichtung eines Endlagers im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erstellung der Ausschreibungsunterlagen und Einholung aktualisierter Angebote.
- AP2: Vorbereitung der Versuchshalle für die bautechnische Realisierung des Technikumsprüfstandes.
- AP3: Bautechnische Realisierung und Synthese der Anlagenkomponenten mit Testläufen zur Funktionalität und Anlagensicherheit.
- AP4: Beschaffung von gewachsenem Steinsalz.
- AP5: Herstellung von Salzschnittblöcken.
- AP6: Untersuchungen zur hydraulisch dichten Ummantelung der Großprüfkörper.
- AP7: Durchführung und Auswertung von Technikumsversuchen unter variierten THM-Beanspruchungen.
- AP8: Erstellung numerischer Berechnungsmodelle zur THM gekoppelten Reanalyse.
- AP9: Rechnerische Reanalyse der Technikumsversuche mit Verifikation und Validation.
- AP10: Erstellung Schlussbericht.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Abschluss der Arbeiten.

AP3: Abnahme und Aufstellung der Triaxialzelle, Funktionstests der Hydraulikkomponenten, Fertigstellung Ölwanne und Lagerfundamente, Bautechnische Realisierung der Lastrahmen und Hydraulikzylinder für EMC-Antriebe, Synthese EMC-Antriebe mit Lastrahmen und Hydraulikzylindern. Konstruktion "Dummy" für Funktionstests und Kalibrierversuche.

AP4: Bohrtechnische Gewinnung gewachsenen Steinsalzes durch GTS Teutschenthal. Erste Teillieferung 28.06.2016.

AP8: Aufbau numerischer Berechnungsmodelle entsprechend Prüfkörpergeometrie → Blockstruktur gemäß geplanter Anordnung der Salzschnittblöcke mit Interface-Elementen, grundlegende Berechnungen zur Funktionalität der Berechnungsmodelle und Verifikation der Berechnungsergebnisse.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung der Versuchsanlage, Inbetriebnahme mit Funktionstests und Kalibrierung. Herstellung von Salzschnittblöcken. Abschluss der Gewinnung von gewachsenem Steinsalz. Numerische Untersuchungen zur Modellierung und Reanalyse der Technikumsversuche.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Düsterloh, U. (2015): Design of a pilot plant to analyze sealing systems based on a bricking of rock salt, In: The Mechanical Behavior of Salt VIII, CRC Press Balkema, Taylor and Francis Group, London UK, 2015.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11435
Vorhabensbezeichnung: MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl ₂ -Lösung (MgO-SEAL)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und -technik, Feld 3.3, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2015 bis 31.07.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 933.119,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kudla	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

MgO-Beton ist als Baustoff für zukünftige Verschlussbauwerke in einem HAW-Endlager im Salinar vorgeschlagen worden. Das Vorhaben MgO-SEAL dient dem Ziel, das Langzeitverhalten von MgO-Spritzbeton nach Lösungskontakt im Maßstab eines realen Bauwerks zu bewerten. Genutzt wird dazu, dass aus Spritzbeton der Rezeptur D4 (5-1-8-Bindemittelphase) in der Grube Teutschenthal errichtete Dammbauwerk GV2 nach einer Standzeit von 7 Jahren. Das Forschungsvorhaben ist ein Beitrag zum Langzeitsicherheitsnachweis von Verschlusselementen aus MgO-Beton mit der 5-1-8-Bindemittelphase für zukünftige HAW-Endlager im Salinar.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Voruntersuchungen, pneumatische Dichtheitsprüfung, Einrichtung des Versuchsortes GV2.
- AP2: Laboruntersuchungen an Bohrkernen aus dem MgO-Beton (Phasenbestand, Festigkeits- und Kriechverhalten, Porosität, Permeabilität).
- AP3: Lösungsangriff (hydraulische Druckbeaufschlagung GV2) über lange Bohrlöcher und über die vorhandene Druckkammer.
- AP4: Planung des selektiven Rückbaus und Nachuntersuchungen.
- AP5: Interpretation der Versuchsergebnisse und Empfehlungen für die Gestaltung von Verschlussbauwerken aus MgO-Spritzbeton.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Für die Bewertung des Ist-Zustandes und für einen Vergleich zwischen beiden Großversuchen wurde nach dem bereits durchgeführten pneumatischen Permeabilitätstest am Bauwerk GV2 (Spritzbetonbauweise) nun auch ein gleichartiger Test am Bauwerk GV1 (Ortbetonbauweise) durchgeführt. Dabei wurde eine (effektive) integrale Gaspermeabilität des Gesamtsystems von $k_{\text{eff}} = 3 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$ bestimmt. Im Vergleich zum im Oktober 2009 ermittelten Wert von $k_{\text{eff}} = 10^{-14} \text{ m}^2$ ist dies eine deutliche Verschlechterung. Ursache dieses Zustandes ist die Verwitterung des in der Grube Teutschenthal anliegende Kieserit- und Tachyhydrit-haltigen Carnallitit. Dieser Prozess ist jedoch nicht für zukünftige HAW-Endlager relevant.
- AP2: Für die Laboruntersuchungen stehen Bohrkern mit Durchmessern von 130 mm, 100 mm und 70 mm zur Verfügung. Für die Permeabilitätsuntersuchungen (Labor AP2 und in situ AP3) wurden eine Endlager-relevante Lösung (NaCl-Lösung mit 2 mol/kg H_2O Mg^{2+}) und eine gesättigte NaCl-Lösung (für eine maximale Einwirkung auf MgO-Beton) hergestellt.
- AP3: Für die Langzeitpermeabilitätsmessungen wurden im MgO-Beton von der Luftseite vier neue Bohrlöcher mit Kerngewinn gestoßen. Zusätzlich wurde eine geneigte Bohrung (B44) zur Sohle gestoßen, in der eine Ringleitung der Verpressebene mit 2K-Injektionsbitumen angeschnitten wurde. In diesem Bohrkern konnte das 2K-Injektionsbitumen und auch das aus benachbarten Verpressebenen stammende Epoxidharz identifiziert werden. In allen gewonnen Bohrkernen konnten nachträglich die Grenzen der Spritzbetonabschnitte zugeordnet werden. Diese Betonierabschnittsgrenzen sind aber sehr unterschiedlich ausgebildet. Die Gaspermeabilitätsmessungen in den Bohrungen B40 und B41 wurden durchgeführt, jedoch noch nicht abschließend ausgewertet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Inbetriebnahme der Druckbeaufschlagungsanlage für den Versuch GV2.
- AP2: Fortsetzung des Laborprogrammes. Detaillierte Untersuchungen der Betonierabschnittsgrenzen.
- AP3: Fortsetzung der Langzeit-Permeabilitätsmessungen mit den beiden Lösungen in den Bohrlöchern B38, B39, B40 und B41. Schrittweise Befüllung der Druckkammer GV2 und Monitoring von eventuellen Feuchteaustritten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 11446A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1; Wirtsgestein Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 30.06.2019	Berichtszeitraum: 01.04.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 330.429,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hampel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Leibniz Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger koordiniert das Vorhaben und betreut die Kooperation mit den Sandia National Laboratories. Er beteiligt sich im Teilprojekt A mit dem von ihm entwickelten Stoffmodell CDM und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D (Itasca).

Nach dem Projektstart führte der Zuwendungsempfänger folgende Arbeiten durch: Erstellung und Abschluss der Kooperationsvereinbarungen mit den deutschen Partnern und mit Sandia, Vorbereitung der und Teilnahme an den ersten Projektworkshops am 21.-22. April in Clausthal und am 02.-03. Juni in Braunschweig.

Mit den Arbeiten im Teilprojekt A wird der Zuwendungsempfänger am 01.10.2016 beginnen, da er bis zum 30.09.2016 noch zu 100 % im Verbundprojekt zum Stoffgesetzvergleich (FKZ 02E10810) beschäftigt ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird am dritten Projektworkshop am 09.-10. August 2016 in Hannover teilnehmen. Ferner wird er die begonnenen bzw. geplanten Arbeiten im Vorhaben WEIMOS auf dem 7th US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation am 07.-09.09.2016 in Washington DC, auf dem 12. Projektstatusgespräch des Projektträgers Karlsruhe (PTKA-WTE) am 09.-10.11.2016 beim KIT und auf dem Fall Meeting der American Geophysical Union (AGU) am 12.-16.12.2016 in San Francisco präsentieren. Mit den Arbeiten in seinem Teilprojekt A wird er am 01. Oktober 2016 beginnen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 11446B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1; Wirtsgestein Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2019	Berichtszeitraum: 01.04.2016 bis 31.03.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 545.980,00 EUR	Projektleiter: Dr. Salzer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum führten die Partner am 21./22. April in Clausthal und am 2./3. Juni in Braunschweig, jeweils einen Projekt-Workshop durch. Auf den Workshops wurden die Planung der weiteren Arbeiten vertieft sowie erste Berechnungsergebnisse zu den gemeinsam vereinbarten und von allen Partnern zu berechnenden Strukturen vorgestellt und besprochen.

Das vorliegende Teilvorhaben B beteiligt sich mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach Minkley und dem Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz nach Günther/Salzer an den geplanten Arbeiten. Dabei wird das Programm FLAC3D (Fa. Itasca) verwendet.

Außerdem organisiert und koordiniert das IfG die Beschaffung weiteren Prüfkörpermaterials aus der WIPP und realisiert die Planung und Durchführung der Laborversuche zur Ableitung der Kriechparameter bei kleinen Deviatorspannungen (AP2), wozu die Entwicklung und der Bau von drei neuartigen Versuchsständen für Kriechversuche mit einer verbesserten Messgenauigkeit vorgesehen ist.

Das IfG hat den 1. und 2. Projekt-Workshop gemeinsam mit den Partnern vorbereitet und durchgeführt. Auf den Workshops wurden die Ergebnisse der bisherigen Planungen und Arbeiten sowie der Zusammenarbeit mit Sandia National Laboratories vorgestellt und diskutiert.

Im April 2016 wurde durch das IfG ein erstes orientierendes Laborprogramm für Kriechversuche mit bereits vorhandenen Kriechversuchsständen vorgestellt und mit den Projektpartnern abgestimmt. Der Start dieser Versuche erfolgte im Mai. Gleichzeitig wurde mit der Entwicklung der neuartigen Kriechversuchsstände mit einer erhöhten Messgenauigkeit begonnen.

Da IfG hat weiterhin auf der Basis der auf dem 1. Projekt-Workshop erfolgten Diskussion zur Modellierung des Verformungsverhaltens infolge von Extensionsbelastungen ein numerisches Modell für die Simulation eines Spaltzug- bzw. indirekten Zugversuchs (Brazilian Test) erarbeitet und allen Projektpartnern zur Verfügung gestellt, an dem beispielhaft die Modellierung eines Zugbruchs untersucht werden soll. Die mit diesem Modell von allen Projektpartnern gewonnenen ersten Ergebnisse wurden auf dem 2. Projekt-Workshop vorgestellt und vergleichend diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im 2. Halbjahr 2016 werden die Kriechversuche mit den konventionellen Prüfständen weitergeführt und erste Ergebnisse vorgestellt. Gleichzeitig ist geplant, den ersten neuartigen Kriechversuchsstand fertigzustellen und wenn möglich einen ersten Test zu beginnen.

Weiterhin werden die Arbeiten zum Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen sowie zur Abstimmung bzw. dem Aufbau des virtuellen Demonstrators fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11446C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1; Wirtsgestein Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2019	Berichtszeitraum: 01.04.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 250.023,00 EUR	Projektleiter: Staudtmeister	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweis-konzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In dem Berichtszeitraum führten die Projektpartner mit dem Startworkshop zwei Projekt-Workshops durch. In diesen wurden zum einen die von den Projektpartnern TUC und IfG durchzuführenden Laborversuche, mögliche Arbeiten zu den Arbeitspaketen 1, 3 und 4 sowie der virtuelle Demonstrator besprochen und diskutiert. Generelles Materialverhalten und Ansätze zum plastischen Verhalten von Steinsalz im Zugspannungsbereich wurden in der Theorie und mit numerischen Modellberechnungen näher untersucht. Erste Berechnungen zum Zugverhalten (Brazil test) wurden durchgeführt und die Ergebnisse vorgestellt und diskutiert. Die Berechnungsergebnisse vom Zuwendungsempfänger haben gezeigt, dass hier Entwicklungsbedarf am vom Zuwendungsempfänger angewendeten Stoffmodellansatz zum Zugverhalten besteht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird an weiteren Workshops teilnehmen. Die Testmatrix zu den Verheilungsversuchen sollen in diesen Workshops besprochen und festgelegt werden, so dass mit den geplanten Versuchen baldmöglichst begonnen werden kann. Das Modell für den virtuellen Demonstrator wird mit den Projektpartnern weiterführend besprochen und erste Modellansätze erstellt. Mögliche Berechnungsmodelle zum AP1 sind weiterhin zu besprechen und festzulegen. Weitere Berechnungen zum Spaltzugversuch (brazil test) werden durchgeführt. Weitere Berechnungsmodelle zum Zugverhalten sind geplant. Anhand von Modellberechnungen soll im folgenden Berichtszeitraum der Zuganteil im Stoffmodell Lubby-CF ausgetestet, weiterentwickelt und verifiziert werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 11446D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1; Wirtsgestein Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2019	Berichtszeitraum: 01.04.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 233.387,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Stahlmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Leibniz Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweis-konzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger beteiligt sich an dem Verbundprojekt im Teilprojekt D mit dem Stoffmodell für Steinsalz TUBSSalt und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen zurzeit das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D der Fa. Itasca.

Im Berichtszeitraum wurden der Start-Workshop in Clausthal sowie ein weiterer Workshop in Braunschweig durchgeführt. Dafür wurden erste Berechnungen an zwei Varianten eines Spaltzugversuches durchgeführt, welche bereits sehr positive Ergebnisse im Hinblick auf die Berücksichtigung von Zugversagen in TUBSSalt zeigen. Zur weiteren Untersuchung von Zugspannungen wird ein Modell für einen Biegebalken erstellt und den Partnern zur Verfügung gestellt.

Für den Virtuellen Demonstrator wurden Abstimmungen bzgl. Art und Umfang der zu modellierenden Situation getroffen. Der Zuwendungsempfänger hat hier bei der Aufbereitung der Besprechungsunterlagen mitgewirkt.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Zeit liegt der Schwerpunkt der Arbeiten auf der genaueren Auswertung der Berechnungen zu Zugspannungen sowie der endgültigen Festlegung des Virtuellen Demonstrators. Außerdem sollen Proberechnungen für geplante Verheilungsversuche durchgeführt werden, um das generelle Verhalten der Stoffmodelle schon frühzeitig beurteilen zu können.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11446E
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1; Wirtsgestein Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2019	Berichtszeitraum: 01.04.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 406.332,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Leibniz Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA. Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert. Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum führten die Projektpartner am 21./22. April 2016 in Clausthal-Zellerfeld und am 02./03. Juni 2016 in Braunschweig jeweils einen Projekt-Workshop durch.

Der erste Workshop war der Startworkshop zum Verbundprojekt WEIMOS. Die Projektpartner diskutierten die geplanten Arbeiten über die Projektlaufzeit und trugen zu den einzelnen Themenbereichen Präsentationen vor. Der Zuwendungsempfänger zeigte den Ansatz zur Beschreibung von Zugspannungen im Stoffmodell Lux/Wolters (AP3) und präsentierte Vorschläge zu den geplanten Versuchen zur Schädigungsrückbildung (AP2).

Auf dem zweiten Projekt-Workshop in Braunschweig wurden von den Projektpartnern numerische Simulationsergebnisse eines Spaltzugversuchs („Brazilian-Test“) zur Bestimmung der einaxialen Zugfestigkeit von Salzgestein vorgestellt. Darüber hinaus zeigte der Zuwendungsempfänger eine detaillierte Ausarbeitung des Versuchsprogramms zur Schädigungsrückbildung (AP3) mit Prognoserechnungen des Materialverhaltens unter den geplanten Versuchsrandbedingungen sowie Modellvorschläge und mögliche Randbedingungen eines zu erstellenden komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells (Virtueller Demonstrator, AP5).

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird am dritten Projekt-Workshop am 09.-10. August 2016 in Hannover teilnehmen und weitere numerische Simulationen zum Verformungsverhalten infolge von Extensionsbeanspruchungen an Salzgestein durchführen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11456A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO-e2), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1, Wirtsgestein: Kristallin		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2016 bis 28.02.2019	Berichtszeitraum: 01.03.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 720.962,00 EUR	Projektleiter: Dr. Huber	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziel des Vorhabens ist es, die Kenntnisse zur Langzeit- Integrität der Bentonitbarriere im Kontakt mit niedrig mineralisierten Grundwässern (z. B. glazialen Schmelzwässern) und die damit verbundene Bentonit-Erosion und potentielle Mobilisation von Tonminerkolloide/ -Nanopartikel aus dem Nahfeldbereich zu untersuchen. Ein weiterer Aspekt ist die Radionuklid-Kolloid und Kolloid-Gesteinsoberflächen Wechselwirkung und der zugrundeliegenden Mechanismen unter naturnahen Bedingungen am Beispiel geklüfteter Granitsysteme zu erweitern 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. Es schließt damit an die Arbeiten der vorangegangenen KOLLORADO Vorhaben an.

Im Einzelnen soll das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel durch die im KIT-INE angewandten spektro-/ mikroskopischen Methoden dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen Radionuklidtransports zu erreichen. Zudem sollen die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse verwendeten Codes ermittelt werden. Im Rahmen der Modellierungsarbeiten werden die Codes COFRAME und d³f++ für den kolloidgetragenen Schadstofftransport anhand von In-situ-Experimenten am Standort Grimsel weiter qualifiziert und Modelle zu Bentoniterosion weiterentwickelt und angewandt. Im vorliegenden Bericht werden die Arbeiten des KIT beschrieben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Status: Zwei Experimente zur Bentoniterosion werden weiterhin durchgeführt und die ersten Ergebnisse des sogen „LIT mock-up“-Tests sind stimmig zu den Ergebnissen vorheriger Erosionsexperimente. Der Versuch wurde hinsichtlich Quelldruck und -distanz, pH-Wert, Amino-G Konzentration, chemische Zusammensetzung und Radionuklidkonzentrationen untersucht. Für den konservativen Tracer Amino-G wurde bereits ein Durchbruch sowie ein Konzentrationsplateau gemessen, welches zeitlich deutlich früher einsetzt als im Feldexperiment. Die Vergleichbarkeit der Laborergebnisse zu den LIT Daten ist aufgrund der viel größeren Verdünnung

im Feldexperiment erschwert. Durch die Auflösung calciumhaltiger Sekundärphasen in den ersten Monaten des Laborversuchs und die dadurch erhöhte Ionenstärke (Überschreitung der CCC) ist die mobile Kolloidkonzentration in den meisten Proben nasschemisch nicht messbar. Die in den Tracervials enthaltenen Radionuklide konnten bislang nicht detektiert werden.

Weiterhin sind kinetische Batchstudien (> 100 Tage) zur Radionuklid-Reversibilität an Kluffüllmaterial des Grimsel Granodiorits für die Einzelemente Am, Np, Pu und Tc sowie im Radionuklidcocktail (Am, Np, Pu, Tc und U) fortgeführt worden. Aufgrund der beobachteten sehr geringen Reversibilität der drei- und vierwertigen Radionuklide, wurde durch Zugabe von synthetischen Ni-Montmorillonit-Kolloiden als Konkurrenzoberfläche versucht, eine Radionukliddesorption durch Gleichgewichtsänderung zu initiieren. Die Messung dieser Proben mittels HR-ICPMS ist abgeschlossen und die erzielten Ergebnisse werden derzeit ausgewertet.

Die Ergebnisse zu dem Effekt der Kluft- Orientierung in Kolloid- Transportversuchen (synthetische Latexkolloide) sind in einem wissenschaftlichen Artikel veröffentlicht worden. Eine Erweiterung der Experimente mit natürlichen Illit-Kolloiden (Verteilung aus 30-40nm und 100nm Größe) aus Soultz-sous-Forets (Frankreich) sowie Illit-du-Puy Kolloiden (70-200nm Größe) unter Verwendung der identischen Fließzelle und hydrogeochemischen Bedingungen wurde begonnen. Vorläufige Ergebnisse deuten auf einen erhöhten Wiedererhalt der Tonkolloide im Vergleich zu den Latexkolloidversuchen hin.

AP1.2: Status: Schwerpunkt der Arbeiten im 1. Halbjahr 2016 lag weiterhin auf der begleitenden Analytik und Interpretation der Proben des „Long term In-situ-Test (LIT)“ sowie einem Remobilisationstest („REMOB“).

- (a) Analyse der regelmäßigen Probenahmen durch den installierten Autosampler sind am INE auf den konservativen Tracer (Amino-G) und Radionuklid- Konzentrationen untersucht worden. RN Daten zeigen erste Signale von Tc-99 im Bereich fg/g und AMS Messungen konnten isobare Interferenzen unterdrücken und diese Tc-99 Signale bestätigen. Insgesamt 22 Proben vom Radionuklidexperiment Run 13-05 einschließlich 6 Proben aus dem Tailing wurden mittels AMS an VERA analysiert. Konzentrationen von U-233, Np-237, Pu-242 und Am-243 in den Tailing-Proben entsprechend 8 Monaten vom Anfang des Experimentes wurden im Bereich fg/g und ag/g bestimmt.
- (b) Das RN Migrationsexperiment Run 13-05 zeigte einen Wiedererhalt der injizierten Tonmineralkolloide von ca. 35-37 % und z. B. von Am und Pu von ca. 25-28 %. Der REMOB Test ist auf eine hydraulische Störung des Injektionsbohrlochs durch Fließrichtungsumkehr und Erhöhung der Fließgeschwindigkeiten ausgelegt, um die über ca. drei Jahre in der Kluft zurückgehaltenen kolloidalen Phasen aus Run 13-05 zu remobilisieren und so einen Vergleich der RN Desorptionskinetiken zwischen Labor- und Felslaborbedingungen zu erreichen.

AP2.4: Status: Modellierungen zum Einfluss der Kluftgeometrie auf das Bentoniterosionsverhalten sowie Bentoniterosionsraten wurden begonnen. Hierzu wurde das an der KTH entwickelte und in COMSOL Multiphysics implementierte Erosionsmodell verwendet. Mittels MATLAB generierter Normalverteilungen für Kluftaperturen wurden heterogene Fließfelder im Modell implementiert, im Gegensatz zu bisherigen Arbeiten, die nur eine konstante Apertur verwendet haben. Erste Ergebnisse zeigen einen deutlichen Einfluss der Kluftheterogenität auf das Erosionsverhalten insbesondere für hohe Fließgeschwindigkeiten ($1E-5$ m/s).

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1 & 2: Die geplanten Arbeiten sind im KOLLORADO- e^2 Antrag ausführlich dargelegt und das neue Laborprogramm ist mit GRS abgestimmt. Schwerpunkt des nächsten ½a wird neben den laufenden Laborversuchen, und Modellierungen vor allem die Probenahme, chemische Charakterisierung und Kolloiddetektion im Rahmen des LIT und REMOB sein. Eine Feldkampagne zur Messung (LIBD) der Kolloidmobilisierung in der CFM Scherzone durch einen Stimulationstest der ETH Zürich im Nahfeld des LIT Versuches ist vorgesehen.

AP3: Für KOLLORADO- e^2 wird weiterhin auf Publikationen in wissenschaftlichen Zeitschriften mit peer-review Verfahren fokussiert (siehe Berichte & Veröffentlichungen).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Stoll, Huber, Darbha, Schill, Schäfer (2016): Impact of gravity, collector surface roughness and fracture orientation on colloid retention kinetic in an artificial fracture. *Journal of Colloid and Interface Science* 475, 171-183.

Rinderknecht, Huber, Heck, Geckeis, Schäfer (in preparation): Impact of sorption time on RN sorption and desorption kinetics on fault gouge material from Grimsel.

Quinto, Lagos, Plaschke, Schäfer, Steier, Golser and Geckeis (in preparation). Multi-actinides analysis with AMS for ultra-trace determination and small sample sizes: application to in-situ tracer experiments and environmental samples and a comparison with SF-ICPMS.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11456B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO-e2), Teilprojekt B	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Kristallin	
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2016 bis 28.02.2019	Berichtszeitraum: 01.03.2016 bis 30.06.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 298.115,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziel des Vorhabens ist es, die Kenntnisse zur Radionuklid-Kolloid und Kolloid-Gesteinsoberflächen Wechselwirkung und der zugrundeliegenden Mechanismen unter naturnahen Bedingungen am Beispiel geklüfteter Granitsysteme zu erweitern 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. Es schließt damit an die Arbeiten der Vorhaben KOLLORADO-1 und KOLLORADO-2 an.

Im Einzelnen soll das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel durch die im KIT-INE angewandten spektroskopischen und mikroskopischen Methoden dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen Radionuklidtransports zu erreichen. Zudem sollen die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse verwendeten Codes ermittelt werden. Im Rahmen der Modellierungsarbeiten werden die Codes COFRAME und d³f++ für den kolloidgetragenen Schadstofftransport anhand von In-situ-Experimenten am Standort Grimsel weiter qualifiziert und Modelle zu Bentoniterosion und Transport weiterentwickelt und angewandt.

Im vorliegenden Bericht werden die Arbeiten der GRS beschrieben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Planung und Vorbereitung mit KIT-INE eines internationalen Benchmarks zur Speziation der in den CFM-Feldexperimenten verwendeten Radionuklide in Bentonit-Porenwasser, Grimsel-Grundwasser und einem ausgewählten Mischwasser (Teilnehmer aus USA, UK, Südkorea, Japan und Deutschland). Erstellung einer Excel-Datei mit Definition und Beschreibung der Testfälle und der zu betrachtenden Randbedingungen der Benchmark-Rechnungen.

Weiterführung der Rechnungen zum Langzeitverhalten von Pu-242 und Am-243 in dem Feldexperiment CFM RUN 12-02. Einbeziehung der im Rahmen von KOLLORADO-e ermittelten Daten zur Sorption/Desorption an Kluftfüllmaterial.

Abschätzung von Desorptionsraten aus den Wiedererhaltungsraten der Kolloide, der tetravalenten und der trivalenten Elemente unter der Annahme von zwei Sorptionsplätzen (mit langsamer bzw. schneller Kinetik). Durchführung orientierender Transportrechnungen für ein weiteres Feldexperiment zur Überprüfung des konzeptuellen Modells mit zwei unterschiedlichen Sorptionsplätzen.

AP3: Vorstellung von Ergebnissen sowie Planung und Festlegung der zukünftigen Arbeiten auf dem KOLLORADO-e² Kickoff Meeting/CFM-Partner Meeting in Karlsruhe.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Koordination in Kooperation mit KIT-INE und Durchführung eines internationalen Benchmarks zur Speziation der in den CFM-Feldexperimenten verwendeten Radionuklide. Versendung der Excel-Datei mit der Aufgabenstellung und Durchführung der Speziationsrechnungen.

Weiterführung der Rechnungen zum Radionuklidverhalten im Langzeit-Tailing der Durchbruchkurven der Feldexperimente. Einbeziehung des Experiments CFM RUN 13-05 und ggf. Erweiterung des Transportmodells um eine Sorptionskinetik, die zwei unterschiedliche Sorptionsplätze berücksichtigt.

Durchführung weiterer Vorhersagerechnungen für ein geplantes Feldexperiment zur kolloidgetragenen Radionuklidmigration.

Simulationsrechnungen der Durchbruchkurven für U und Np in CFM RUN 13-05 und CRR #32 unter Berücksichtigung der Redoxkinetik und der dadurch bedingten mit zunehmender Transportzeit erhöhten Sorption.

AP3: Teilnahme an dem CFM Modeller Meeting und Diskussion der Ergebnisse mit den anderen Modellierergruppen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11466
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.3, Wirtsgestein: unabhängig	
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2019	Berichtszeitraum: 01.04.2016 bis 30.06.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.447.555,00 EUR	Projektleiter: Reiche

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Inhalt dieses FuE-Vorhabens ist die Entwicklung eines Rechenmoduls für das Programmpaket RepoTREND zur Simulation von Prozessen im Nahfeld eines Endlagersystems. Dabei muss die dem Nahfeldmodul zugrunde liegende Softwarearchitektur (sie definiert die grundlegenden Komponenten eines Softwaresystems und beschreibt die Zusammenhänge, die zwischen den Komponenten bestehen) vor allem eine hohe Modularität der Programmstruktur und eine hohe Flexibilität gegenüber neuen Anforderungen aufweisen, um eine einfache Modifikation und Erweiterung des Programmcodes zu gewährleisten. Die Entwicklung einer Softwarearchitektur mit den genannten Hauptmerkmalen ist eine Voraussetzung für den Erfolg des gesamten Projekts und beeinflusst maßgeblich den erforderlichen Aufwand für die Entwicklung des Programmcodes. Die Erstellung relevanter Softwarearchitektur gilt deswegen als das wichtigste Teilziel des Projekts.

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: Anforderungsanalyse und Wissensmanagement. Anforderungen werden ermittelt, spezifiziert, analysiert, strukturiert, abgestimmt und bewertet. Das Wissensmanagement umfasst sowohl interne Maßnahmen (wie Know-How-Transfer durch interne Diskussionsrunden) als auch das Einbeziehen des Know-Hows von externen Experten (z. B. durch die Teilnahme an den fachlichen Konferenzen).
- AP2: Vorarbeiten für die Codeentwicklung. Neue Konzepte und Modelle müssen erstellt werden: konzeptionelles, mathematisches und numerisches Modell des Nahfeldmoduls, Entwurf der Softwarearchitektur, Entwurf einzelner Programmkomponenten, Optimierungskonzepte.
- AP3: Codeentwicklung. Umsetzung der in AP2 erarbeiteten Konzepte in einen Programmcode.
- AP4: Test, Qualitätssicherung, Dokumentation. Umfangreiche Tests ist in allen Programmentwicklungsphasen werden durchgeführt. Die folgenden QS-Maßnahmen werden geleistet: Standardisierung der Arbeitsprozesse, Versions- und Konfigurationsmanagement, Release-Freigebe, Bugtracking, Lokalisierung von Problemen, Programmkommentare, Konventionen, Review des Programmcodes. Die gesamte Entwicklung über alle Phasen wird ausführlich dokumentiert.
- AP5: Verfolgung von Anforderungen aus aktuell laufenden FuE-Projekten. Die Anforderungen aus den aktuell laufenden FuE-Projekten werden aufgenommen und so weit analysiert, dass eine Entscheidung getroffen werden kann, ob eine Anforderung bei der aktuellen Entwicklung berücksichtigt werden kann oder später, im Rahmen eines separaten Projekts bzw. Arbeitspakets, realisiert werden soll.
- AP6: Berichte zum Projektfortschritt. Alle durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse werden in Halbjahres- und Jahresberichten sowie im Abschlussbericht dokumentiert.

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 "Computational Methods in Water Resources 2016" vom 20. zum 24.6. in Toronto (Kanada) teilgenommen. Auf der Konferenz wurde ein Vortrag über die Konzepte zur einfachen Integration von Effekten in den Basisprozess gehalten, die im neuen RepoTREND-Nahfeldmodul NaTREND umgesetzt werden sollen (s. Pkt. 5.).
- AP2: Es wurde ein Designmuster für die Softwarearchitektur entwickelt, das eine einfache Integration neuer zu berücksichtigender Effekte in die Basisgleichungen sowie eine einfache Änderung bereits vorhandener Effekte erlaubt. Bei diesem Muster werden alle Abhängigkeiten zwischen den relevanten Effekten in ein separates Objekt (Situation-Klasse) ausgelagert. So werden die Effekt-Objekte voneinander komplett unabhängig. Dieses Muster erlaubt eine einfache Realisierung von Systemzustandsänderungen, die während einer Simulation eintreten. Die Logik, wie relevante Effekte miteinander korrelieren, wird nicht über die Effekt-Objekte verteilt sondern in einem separaten Situations-Objekt umgesetzt. Das macht es einfacher, diese Logik zu verstehen und zu steuern.
- AP3: Es wurde mit der Entwicklung des im AP2 erwähnten Konzepts zur Integration von Effekten in die Basisgleichungen begonnen.
- AP4: Es wurden Unit-Tests zu bereits umgesetzten Programmstrukturen durchgeführt. Das im AP2 erwähnte Konzept zur Integration von Effekten in die Basisgleichungen wurde in Form von UML-Diagrammen dokumentiert. Die zugrunde liegenden Entscheidungen wurden im Softwarearchitekturdokument festgehalten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Schwerpunkt im nächsten Halbjahr ist das AP2. Weiterhin sollen für das Nahfeldmodul *NaTREND* relevante vorhandene Modelle und Konzepte identifiziert und evaluiert sowie eigene Konzepte erstellt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Reiche, T.: Development of a Program Data Structure Enabling the Flexible Integration of Effects into a Basis Flow Model, 20.-24. July, 2016, Toronto
(https://www.conftool.pro/cmwr2016/index.php?page=browseSessions&form_session=53).

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11476A	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt A			
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.3, Wirtsgestein: unabhängig			
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 30.06.2019		Berichtszeitraum: 01.04.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 723.180,00 EUR		Projektleiter: Schneider	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit d^3f und r^3t wurden Werkzeuge zur Modellierung der dichteabhängigen Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien (Vorhaben GRUPRO bzw. TRAPRO) mit expliziter Berücksichtigung von Wärmetransport, Klüften und Kluftsystemen sowie freier Grundwasseroberflächen (E-DuR) entwickelt. Durch die Umstellung auf die neue, C++-basierte Plattform UG4 erfuhren die Codes eine deutliche Beschleunigung und wurden zu einem einheitlichen Werkzeug „ d^3f++ “ integriert (A-DuR, H-DuR). Der Code d^3f++ wurde bzw. wird in den Vorhaben WEIMAR, QUADER und SANTOS angewendet.

Das Vorhaben hat eine Anwendung des Grundwasserströmungs- und Transportcodes d^3f++ auf endlagerrelevante Aufgabenstellungen, Vergleichsrechnungen mit anderen Codes und damit einen Nachweis seiner Leistungsfähigkeit sowie die Erhöhung des Vertrauens in die Modellierungsergebnisse zum Ziel. Dazu gehören eine Weiterentwicklung der Lösungsverfahren insbesondere für regionale Modelle mit freier Grundwasseroberfläche, eine weitere Beschleunigung und eine breitere Anwendbarkeit. Letzteres soll neben Verbesserungen in Benutzeroberfläche und Präprozessor durch die Einführung eines Speicherterms geschehen, dessen Implementierung in d^3f++ eine genauere Modellierung kurzfristiger Prozesse ermöglicht.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP1: Anwendungs- und Vergleichsrechnungen

AP2: Erweiterung des Anwendungsbereichs d^3f++

AP4: Projektleitung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1: Äspö Task 9

Die Arbeiten zu Äspö Task 9 wurden auf dem gemeinsamen Meeting der Task Forces EBS und Groundwater Flow and Transport of Solutes verfolgt.

AP1.2: Site Descriptive Model (SDM) für Äspö

SKBs Interesse an einem Site Descriptive Model für Äspö liegt u. a. darin, Erfahrung in der Vorgehensweise für ein großräumiges Strömungsmodell zu sammeln, die dann auch für Forsmark eingesetzt werden soll. Ein generelles Vorgehen wurde mit SKB abgestimmt und ein entsprechender Arbeitsplan ausgearbeitet. Die vorgesehene Projektlaufzeit von GRUSS ist dabei berücksichtigt. Dabei sollen drei Modelle mit unterschiedlicher Größe und unterschiedlichem Detaillierungsgrad entstehen.

AP4: Am 18.5.2016 fand beim G-CSC in Frankfurt ein Projektaufstart-Gespräch statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.1: Task 9

- Analyse der bisher durchgeführten Arbeiten zu Task 9a und 9b
- Erarbeitung eines Modellkonzepts zu Task 9b

AP1.2: SDM

- Absprache mit SKB über das erste Modell
- Übernahme der zugehörigen Daten.
- Beginn der Modellerstellung

AP2.1: Mit der Erweiterung der Strömungsgleichung in d^3f++ um einen Speicherterm wird begonnen.

AP4: Das erste Projektstatusgespräch wird am 25.11.2016 bei der GRS in Braunschweig stattfinden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Theodor-W.-Adorno-Platz 1, 60323 Frankfurt am Main		Förderkennzeichen: 02 E 11476B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.3; Wirtsgestein: unabhängig		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 30.06.2019	Berichtszeitraum: 01.04.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 595.088,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Wittum	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziele des Projekts sind eine Anwendung des Grundwasserströmungs- und Transportcodes d^3f++ auf endlagerrelevante Aufgabenstellungen, Vergleichsrechnungen mit anderen Codes und damit einen Nachweis seiner Leistungsfähigkeit sowie die Erhöhung des Vertrauens in die Modellierungsergebnisse. Dazu gehört eine Weiterentwicklung von d^3f++ hinsichtlich einer verbesserten Robustheit der Lösungsverfahren insbesondere für regionale Modelle mit dünnen Schichten und freier Grundwasseroberfläche, einer weiteren Beschleunigung der Rechnungen und einer breiteren Anwendbarkeit. Letzteres soll neben Verbesserungen in der Benutzeroberfläche und der Modellerstellung durch die Einführung eines Speicherterms geschehen, der eine genauere Modellierung kurzfristiger Prozesse ermöglicht. Hierzu sollen im Projekt Anwendungs- und Vergleichsrechnungen: 1.1 Äspö Task 9, 1.2 „Äspö site descriptive model“, 1.3 Modell der WIPP Site (AP1), die Erweiterung des Anwendungsbereichs von d^3f++ : 2.1 Erweiterung der Strömungsgleichung in d^3f++ um einen Speicherterm, 2.2 Weiterentwicklung des Präprozessors ProMesh (AP2) und die Weiterentwicklung der Lösungsverfahren: 3.1 Übertragung und Implementierung des LIMEX-Verfahrens, 3.2 Robuste Glättungsverfahren für den geometrischen Mehrgitterlöser, 3.3 Verbesserung der Grobgitterkorrektur, 3.4 Anpassung der FAMG-Verfahren an die thermohaline Grundwasserströmung und parallele Skalierbarkeit, 3.5 Parallele adaptive Verfahren und angepasste Gitterstrukturen, 3.6 Stabile Modellierung freier Grundwasseroberflächen (AP3) eingebracht werden.

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Das Simulationssystem UG ist weltweit über 390-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. Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben der drei BMBF-Projekte vom 01.10.2006-31.03.2011 (FKZ 02E10326), vom 01.10.2008-30.09.2012 (FKZ 02E10568) und vom 01.03.2012-31.10.2015 (FKZ 02E11062).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP1: Anwendungs- und Vergleichsrechnungen

AP2: Erweiterung des Anwendungsbereichs von d^3f++

AP3: Weiterentwicklung der Lösungsverfahren

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die unter AP2 beschriebenen Werkzeuge wurden zur Generierung eines ersten Modells der WIPP Site genutzt. Um erste Tests mit Diskretisierung und Lösern zu vereinfachen, wurden dabei zunächst einige ähnliche Schichten des Problemgebiets zusammengefasst. Die vorgestellte Technik zur Gittergenerierung lässt sich aber auch auf das vollständige Modell anwenden. Mithilfe des generierten Modells wurden erste Rechnungen durchgeführt. Die entstandene Infrastruktur und die gewonnenen Erkenntnisse dienen als Grundlage für die Weiterentwicklung der robusten Lösungsverfahren und Adaptionsstrategien im AP3.
- AP2: Um dreidimensionale großflächige Gebiete, die aus übereinander liegenden dünnen Schichten bestehen, beschreiben zu können, wurde der Präprozessor ProMesh in Hinblick auf die Erzeugung hochgradig anisotroper, prismenbasierter Gitter erweitert. Ausgehend von rasterbasierten Höhenprofilen der einzelnen Schichtgrenzen werden dazu zunächst Schichtgrenzen und Ränder identifiziert und diese zusammen mit dem Gebietsrand mittels Constrained-Delauney-Triangulierung zu einem zweidimensionalen (horizontalen) Dreiecksgitter vernetzt. Anschließend wird wiederholt eine Projektion dieses Gitters entlang der vertikalen Achse durchgeführt, wobei pro Schritt eine Lage Prismen erzeugt wird. Als Projektionsfläche dient dabei jeweils die nächste untere Schichtgrenze. Läuft eine Schicht im Inneren eines Gebiets aus, so werden die übrigen Prismen dieser Lage benachbarten Schichten zugewiesen. Der gesamte Meshing-Vorgang ist dabei vollständig automatisiert und über aussagekräftige Parameter parametrisiert. Die Anwendung findet über einen übersichtlichen Tool-Dialog im ProMesh Benutzerinterface statt. Die Anwendung und Kombination der verschiedenen Schritte ist über ein ProMesh-Skript definiert und kann deshalb auch von Anwendern bei Bedarf leicht angepasst werden.
- AP3: Eine entscheidende Technik zur Verbesserung der Glättungseigenschaft von Mehrgitterverfahren auf hochgradig anisotropen Geometrien ist die Reduktion der Anisotropie durch anisotrope Verfeinerung bei der Erzeugung der zugrunde liegenden Mehrgitterhierarchien. Ein Algorithmus zur automatischen anisotropen Verfeinerung wurde implementiert und für das WIPP Problem getestet. Dabei konnte die erwartete verbesserte Robustheit des Glätters in der Praxis beobachtet werden. Dies hat auch entscheidende Konsequenzen für die Parallelisierung, da es damit auf höheren Ebenen ausreicht, lokale Kopplungen bei der Glättung zu berücksichtigen. Die Parallelisierung robuster Glätter wie dem ILU Verfahren ist ohne Verluste in der Leistungsfähigkeit nicht ohne weiteres möglich. Der sehr effiziente Ansatz über blockweise Jacobi Glättung zwischen den Prozessen mit prozessweise lokaler ILU Glättung hat sich dabei als sehr praktikable und effiziente Alternative erwiesen. Dieser Ansatz kann bei starker Parallelisierung allerdings die erwünschten Eigenschaften der ILU Glättung auf hochgradig anisotropen Gittern mildern. Ein hybrider Ansatz wurde deshalb verfolgt, um die effiziente Parallelisierung für hohe Prozesszahlen zu ermöglichen. Unter Ausnutzung der in UG4 verfügbaren hierarchischen Verteilung konnte ein Lösungsansatz entwickelt werden, der durch geschachtelte Anwendung von Mehrgitterverfahren auf der verteilten Geometrie sowie einem parallelen Grobgitterlöser auf einer Teilmenge der verfügbaren Prozessoren einen skalierbaren parallelen Löser für dichtegetriebene Strömung auf hochgradig anisotropen Gebieten darstellt. Unter Einbeziehung der übrigen Entwicklungen im Rahmen des AP3 verspricht dieser Ansatz einem entscheidenden Schritt zu einem skalierbaren, robusten Löser auf massiv parallelen Systemen zu sein.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11486A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik, Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Wirtsgestein: unabhängig		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2018	Berichtszeitraum: 01.04.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 224.999,00 EUR	Projektleiter: Dr. Wolf	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Wesentlichen soll eine Vorgehensweise entwickelt werden, die eine nachvollziehbare Abwägung zwischen den Anforderungen an die Sicherheit während der Betriebsphase und der Langzeitsicherheit erlaubt. Für die deutschen Endlagerkonzepte in Ton- und Salzgestein werden auf der Basis von FEP die Abhängigkeiten zwischen Betriebs- und Nachverschlussphase dokumentiert. Darauf basierend sollen Methoden und Ansätze entwickelt werden, die eine nachvollziehbare Bewertung der Abhängigkeiten von Betriebs- und Nachbetriebsphase erlauben. Des Weiteren werden im Rahmen der Arbeiten die Grundzüge für ein Sicherheitskonzept in der Betriebsphase erstellt und geprüft, ob es Harmonisierungsbedarf zwischen den Sicherheitskonzepten der Betriebs- und Nachverschlussphase gibt. Mit diesem Vorhaben werden neuartige konzeptionelle Ansätze und methodische Voraussetzungen geschaffen, die es erlauben, einen konsistenten und in sich geschlossenen Sicherheitsnachweis zu führen. Die gemeinsame Bearbeitung des Vorhabens durch die DBE TECHNOLOGY und die GRS, insbesondere deren Arbeiten auf dem Gebiet der Betriebs- und Langzeitsicherheit und Mitarbeit in entsprechenden internationalen Gremien bilden die Grundlage für eine erfolgreiche Durchführung des Vorhabens.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst die folgenden Arbeitspakete:

- AP1: Grundlagen (rechtlicher Rahmen, internationale Empfehlungen, Endlagerkonzepte)
 - AP2: Grundzüge eines Sicherheitskonzepts für die Betriebsphase
 - AP3: Zusammenstellung eines Kataloges mit FEP beim Bau und Betrieb eines Endlagers
 - AP4: Bewertung der Betriebsphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf die Langzeitsicherheit
 - AP5: Bewertung der Nachverschlussphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf den sicheren Betrieb eines Endlagers
 - AP6: Methoden und Ansätze
 - AP7: Dokumentation
- GRS ist federführend für die Arbeitspakete 1, 4, 6 und 7.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Es wurde damit begonnen, die internationalen Empfehlungen zur Behandlung der Betriebs- und Nachverschlussphase im Safety Case (z. B. IAEA, NEA) auszuwerten. Die Ergebnisse der GEOSAF-Projekte wurden ebenfalls ausgewertet.

AP3: Es wurde damit begonnen, eine FEP-Liste für die Betriebsphase zu erstellen.

AP4: Die bereits zusammengestellten FEP aus AP3 wurden hinsichtlich ihrer Relevanz für die Langzeitsicherheit der deutschen Endlagerkonzepte in Salz- und Tongestein bewertet.

Die Arbeiten in den anderen AP wurden noch nicht begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Im zweiten Halbjahr des Jahres 2016 erfolgt der Abschluss der Auswertungen der internationalen Empfehlungen und Projekte. Im Rahmen eines vierwöchigen IAEA-Stipendiums wird eine Mitarbeiterin von SURAO (CZ) in die Arbeiten eingebunden.

AP2: Die Arbeiten zum Sicherheitskonzept in der Betriebsphase werden im dritten Quartal des Jahres 2016 begonnen.

AP3+4: Die Arbeiten an der FEP-Liste für die Betriebsphase und die Bewertung der FEP werden fortgeführt.

AP5: Die Arbeiten zur Bewertung der FEP für die Nachverschlussphase von Endlagern in Ton- und Salzgestein hinsichtlich ihrer Bedeutung für die Betriebsphase werden im dritten Quartal des Jahres 2016 begonnen.

AP6+7: Die Arbeiten in diesen AP beginnen erst im Jahr 2017.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11486B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik, Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Wirtsgestein: unabhängig		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2018	Berichtszeitraum: 01.04.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 200.389,80 EUR	Projektleiter: Filbert	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das wesentliche Ziel des Vorhabens ist es, eine Vorgehensweise zu entwickeln, die eine nachvollziehbare Abwägung zwischen den Anforderungen an die Sicherheit während der Betriebsphase eines Endlagers für ausgediente Brennelemente und wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und der Langzeitsicherheit erlaubt. Für die deutschen Endlagerkonzepte in Ton- und Salzgestein werden auf der Basis von FEP die Abhängigkeiten zwischen Betriebs- und Nachverschlussphase dokumentiert. Darauf basierend sollen Methoden und Ansätze entwickelt werden, die eine nachvollziehbare Bewertung der Abhängigkeiten von Betriebs- und Nachbetriebsphase erlauben. Des Weiteren werden im Rahmen der Arbeiten die Grundzüge für ein Sicherheitskonzept in der Betriebsphase erstellt und geprüft, ob es Harmonisierungsbedarf zwischen den Sicherheitskonzepten der Betriebs- und Nachverschlussphase gibt. Mit diesem Vorhaben werden neuartige konzeptionelle Ansätze und methodische Voraussetzungen geschaffen, die es erlauben, einen konsistenten und in sich geschlossenen Sicherheitsnachweis zu führen. Die gemeinsame Bearbeitung des Vorhabens durch die DBE TECHNOLOGY und die GRS, insbesondere deren Arbeiten auf dem Gebiet der Betriebs- und Langzeitsicherheit und Mitarbeit in entsprechenden internationalen Gremien bilden die Grundlage für eine erfolgreiche Durchführung des Vorhabens.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst die folgenden Arbeitspakete:

- AP1: Grundlagen (rechtlicher Rahmen, internationale Empfehlungen, Endlagerkonzepte)
- AP2: Grundzüge eines Sicherheitskonzepts für die Betriebsphase
- AP3: Zusammenstellung eines Kataloges mit FEP beim Bau und Betrieb eines Endlagers
- AP4: Bewertung der Betriebsphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf die Langzeitsicherheit
- AP5: Bewertung der Nachverschlussphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf den sicheren Betrieb eines Endlagers
- AP6: Methoden und Ansätze
- AP7: Dokumentation

DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für die Arbeitspakete 2, 3 und 5.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Es wurde mit der zusammenfassenden Darstellung der folgenden für das Vorhaben ausgewählten Endlagerkonzepte begonnen.

Für Steinsalz:

- Bohrlochlagerung (rückholbaren Kokille (BSK-R))
- Streckenlagerung (POLLUX[®]-Behälter)

Für Tonstein:

- Bohrlochlagerung (BSK-R)
- Streckenlagerung (POLLUX[®]-Behälter)

Im Juni wurden in einem Vortrag beim Joint NEA/IAEA Workshop zur Operational Safety of Geological Repositories Aspekte der Betriebssicherheit vorgestellt und diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Im 3. Quartal 2016 erfolgt der Abschluss der zusammenfassenden Darstellung der Endlagerkonzepte

AP3: Im 3. Quartal 2016 wird die Zusammenstellung eines Kataloges mit FEP zum Bau und Betrieb eines Endlagers aufgenommen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Design, Fabrication and Demonstration of Safety and Reliability of Transport and Emplacement Systems for a HLW Repository in Germany, Joint NEA/IAEA Workshop, 29.06.-01.07.2016, OECD, Paris

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11496A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2016 bis 30.04.2019	Berichtszeitraum: 01.05.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 786.134,00 EUR	Projektleiter: Dr. Munoz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel dieses Vorhabens ist das wesentlich verbesserte Verständnis der metallischen Korrosion der Abfallbehälter in salzhaltigen, geochemischen Milieus und der Rückhaltung von Actiniden durch die Korrosionsprodukte unter den im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle im Ton- und im Salzgestein herrschenden Temperatur- und Druckbedingungen. Die Anwendung elektrochemischer Hochdruck/Hochtemperatur-Messmethoden mit samt moderner Spektroskopie- und Mikroskopie-Techniken soll dem Abbau von Ungewissheiten und Konservativitäten bei der Erstellung einer Langzeitprognose für die Freisetzung von Actiniden nach einem Ausfall von Endlagerbehältern dienen. Das Vorhaben steht in enger Verbindung zu dem Vorhaben KORPHA 02E11314, das die Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen zum Ziel hat. Beide Vorhaben leisten damit einen Beitrag zur sicherheitsanalytischen Bewertung des Langzeitverhaltens von Ton- und Salzformationen als Endlagerwirtsgesteine.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Im Einzelnen werden folgende Teilziele verfolgt

- Konzipierung und Durchführung von Korrosionsexperimenten
- Aufbau einer elektrochemischen Messzelle zur Untersuchung der Korrosionskinetik
- Durchführung Voltammetrie- und elektrochemischer Impedanz-Experimente
- Identifizierung generierter Korrosionsprodukte: chemische/kristallographische Analyse
- Morphologische Analyse der korrodierten Oberfläche und Identifizierung aktiver (Metalauflösung) und passiver (kathodische Gegenreaktion) Bereiche
- Bestimmung der Rückhaltung von Actiniden an ausgewählten Eisenkorrosionsprodukten, Identifizierung sorbierter Spezies und Aufklärung von Sorptionsmechanismen.
- Pilotstudie zur Anwendung quantenchemischer Methoden zur Untersuchung der Actinidenwechselwirkung mit Eisenoxidoberflächen
- Ergebniszusammenführung und Berichterstattung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In den ersten 2 Monaten sind folgende Aktivitäten durchgeführt worden:

- Bestellung und Lieferung des Hochdruckreaktors mit Accessoires und Potentiostat
=> Aufbau und Inbetriebnahme sind für September geplant
- Abstimmung der Aktivitäten mit den Projektpartnern per Videokonferenz Anfang Juni
=> Kickoff-Meeting ist am 15. September 2016 in BS vorgesehen
- Abschluss eines Kooperationsvertrages zwischen GRS und INE-KIT

4. Geplante Weiterarbeiten

- Aufbau und Inbetriebnahme des Hochdruckreaktors mit Accessoires und Potentiostat
- Kickoff-Meeting am 15. September 2016 in BS
- Beginn experimenteller Untersuchungen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11496B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1, Wirtsgestein: Salz		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2016 bis 30.04.2019	Berichtszeitraum: 01.05.2016 bis 30.06.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 400.000,00 EUR	Projektleiter: Dr. Finck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die chemische und mechanische Stabilität von Metallbehältern mit radioaktiven Abfällen stellt im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse einen wichtigen Aspekt dar. Für eine robuste Modellierung der Behälterkorrosion unter endlagerrelevanten Bedingungen ist ein detailliertes Verständnis der Teilprozesse des korrodierenden Materials erforderlich. Information zur Metallkorrosion für Bedingungen eines Endlagers in Steinsalz stehen nur sehr begrenzt aus der Literatur zur Verfügung. Ziel des Vorhabens ist es das Verständnis der Metallkorrosion der Abfallbehälter im salzhaltigen Milieu unter den im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle herrschende T- und P- Bedingungen wesentlich zu verbessern. Mit Hilfe elektrochemischer Methoden sollen Teilreaktionen erschlossen werden, und mit Hilfe spektroskopischer und mikroskopischer Methoden die Struktur und die Zusammensetzung der Korrosionsprodukte sowie deren Oberflächen- Morphologie charakterisiert werden. Ein weiterer Schwerpunkt des Vorhabens ist es die Rückhaltung von Radionukliden an synthetischen, gut charakterisierten Referenz- Eisenkorrosionsprodukte mittels spektroskopischer und chemischer Methoden zu untersuchen. Ziel dieser Arbeiten ist es Unsicherheiten bezüglich der Wechselwirkung dieser Sekundärphasen mit Radionukliden und der langfristigen Prognostizierbarkeit der Auswirkungen auf die Radionuklidmobilität abzubauen. Eine Zusammenarbeit läuft mit der GRS Braunschweig.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP0: Literaturstudie
- AP1: Elektrochemische Untersuchungen
- AP2 Identifizierung von Eisenkorrosionsphasen und Sorption von Actiniden
- AP2.2: Langzeitkorrosionsexperimente und Sorption von Actiniden
- AP2.3: Quantenchemischen Rechnungen
- AP3: Dokumentation und Publikation

2.2 Vorhaben Bereich 6

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: 01.01.2016 bis 30.06.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 950.632,00 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):* Unterstützung bei Implementierung der DFÜ von Safeguards-Daten aus den Standort-Zwischenlagern; Vorbereitung eines DFÜ-Feldtests in Leistungsreaktoren; c) *Safeguardsanalytik:* Promotionsprojekt zur Synthese von Kalibrierstandards und Referenzmaterialien; Qualifizierung Jülichs für das Netzwerk der IAEO-Analyselaboratorien (NWAL); d) *Satellitenfernerkundung:* Projekt zum Einsatz von Fernerkundung in der IAEO; e) *Geoinformationstechnologien:* Entwicklung einer Pro-

- zedur zur Erstellung GIS-fähiger Anlagenpläne; f) *Inspektionsplanung und -bewertung*: Projekt zur Verbesserung der Kernmaterialüberwachung der IAEA unter Einbezug neuer analytischer Methoden aus Statistik 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; Mitarbeit in der Safeguards-Expertengruppe ASTOR; 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.
 - Unterstützung des staatspezifischen Kontrollkonzeptes (SLC): Akquisitionspfadanalyse (APA)
 - Kooperation mit der DGAP: Expertensitzung bei der DGAP zu den Themen a) nukleare Abschreckung, b) transnationale elektronische Kommunikationsüberwachung durch Nachrichtendienste sowie c) Endlagerung radioaktiver Reststoffe (2.6.2016).
 - Pflege des nationalen Safeguards-Internetportals „safeguards.de“
 - ESARDA Mitarbeit: Vize-Präsidentschaft, Steering und Editorial Committee; AGn „Verification Technologies and Methodologies“, „Containment and Surveillance“, „Destructive Analysis“, „Non-destructive Analysis“, „Training and Knowledge Management“, „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 sowie beim Feldtest in Reaktoren.
- Safeguardsanalytik: Fortsetzung des Promotionsprojekts zur Synthese von Kalibrierstandards und Referenzmaterialien; Fortsetzung der NWAL-Qualifizierung Jülichs.
- Satellitenfernerkundung: Machbarkeitsstudie zu Sentinel-1 Radardaten.
- Geoinformationstechnologien: Weiterentwicklung einer Prozedur zur Erstellung GIS-fähiger Anlagenpläne.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Wissenschaftliche Beiträge, Sitzungsteilnahme bei der IAEO.
- Novel Technologies: Fortsetzung der Studie zu Navigations- und Positionierungstechniken.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von SLC, APA, SBD und 3S (Safety-Security-Safeguards).
- Endlagerung: Fortsetzung der Grundlagenermittlung zur Fortschreibung der Safeguardskonzepte.
- Unterstützung des BMWi bei Umsetzung des Zusatzprotokolls und Bewertung von IS und SLC.
- 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-Gremien und -Arbeitsgruppen.
- Mitarbeit in den nationalen Gremien AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis, SAGSI-Mitarbeit.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Listner, C., Niemeyer, I., Canty, M.J. & G. Stein (2016): A Strategic Model for State Compliance Verification. In: *Naval Research Logistics* 63(3), 260-271

Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung

In den Halbjahresberichten werden in kurzgefasster Form die Ergebnisse der laufenden Forschungsvorhaben dargestellt. Vorhabenrelevante Publikationen werden, soweit es der Platz zulässt, zwar aufgelistet, es ist aber nicht immer möglich alle Veröffentlichungen (schriftlich oder mündlich) aufzunehmen. Ferner waren bisher Informationen zu Aus- und Weiterbildungsmaßnahmen nicht explizit aufgenommen worden.

Es wurde daher vereinbart, zukünftig die Gesamtzahl der Publikationen zu nennen und Informationen zu Ausbildungsaspekten zu geben. Dies erfolgt erstmals in diesem Halbjahresbericht. Zahlen wurden von den Vorhabennehmern zur Verfügung gestellt und das Jahr 2015 als Referenz ausgewählt.

Diese zusammenfassende Darstellung wird im jährlichen Rhythmus erfolgen, d. h. sie wird jeweils im zweiten Halbjahresbericht erscheinen. Damit soll - zusätzlich zur Kurzdarstellung der Vorhabenergebnisse - dokumentiert werden, dass und wie die Ergebnisse verbreitet, bekanntgemacht und publiziert werden.

Publikationen

Im Jahr 2015 wurden insgesamt 44 Publikationen in begutachteten Journalen, in Form von Schlussberichten, Doktor-, Master-, Bachelor- und Studienarbeiten vorgenommen. Davon sind ca. 52 % Universitäten, ca. 27 % Einrichtungen der Helmholtz-Gemeinschaft und ca. 21 % sonstigen Forschungseinrichtungen und Firmen zuzuordnen.

Im Jahr 2015 wurden auf Konferenzen, bei Workshops und sonstigen Veranstaltungen insgesamt 99 Vorträge gehalten und Ergebnisse (Poster etc.) präsentiert. Davon entfielen ca. 42 % auf Universitäten, ca. 24 % auf Einrichtungen der Helmholtz-Gemeinschaft und ca. 33 % auf Forschungseinrichtungen und Firmen.

Aus- und Weiterbildung




Ein strategisches Forschungsziel der BMWi-Förderung ist die Bereitstellung von Expertise und Wissen, der wissenschaftlich-technischen Kompetenz und als wichtiges Element dabei die Unterstützung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses.

Die Aus- und Weiterbildung von Post-Docs, Doktoranden, Master- und Bachelorstudenten erfolgt nahezu ausschließlich durch Universitäten und Einrichtungen der Helmholtz-Gemeinschaft. Gleichwohl erfolgt in einzelnen Fällen die Ausbildung von Studenten im Rahmen einer wissenschaftlichen Kooperation zwischen Universitäten und Firmen.



Im Jahr 2015 waren 60 Nachwuchswissenschaftler in FuE-Vorhaben eingebunden.

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)	60
02 E 11395	Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschiechten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA)	130
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), 12200 Berlin		
1501509	Langzeitverhalten von Metall- und Elastomerdichtungen sowie Polyethylen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (LaMEP)	18
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)	32
02 E 10760	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsausgabe zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen - Kurztitel: URSEL	38
02 E 11061B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein	58
02 E 11152	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	76
02 E 11182B	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS	80
02 E 11193B	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	84
02 E 11263	Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa)	94
02 E 11294	Entwicklung technischer Konzepte zur Rückholung von Endlagerbehältern mit wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen aus Endlagern in Salz- und Tongesteinsformationen (ERNESTA)	98
02 E 11375A	Verbundprojekt: Machbarkeitsuntersuchung zur Entwicklung einer Sicherheits- und Nachweismethodik für ein Endlager für Wärme entwickelnde Abfälle in einer Kristallingesteinsformation in Deutschland (CHRISTA), Teilprojekt A	124

- 02 E 11385** Entwicklung von Monitoring-Konzepten in Anlehnung an Sicherheits- und Nachweiskonzepte sowie Ableitung von Entscheidungsgrößen und Reaktionsoptionen (MONTANARA)  128
- 02 E 11405A** Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt A  132
- 02 E 11486B** Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt B  180


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)  40
- 02 E 11446A** Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A  158








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

- 02 E 11344C** Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilproject C  116

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

- 02 W 6263** Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden  188

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

- 02 E 10377** Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen  28
- 02 E 10719** Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)  30
- 02 E 10740** Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager  34
- 02 E 10750** Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsausgabe zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen - Kurztitel: URSEL  36
- 02 E 10941** Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL  52
- 02 E 10951** Diffusion in kompaktiertem Salzgrus – DIKOSA  54
- 02 E 11061A** Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein  56

