## KIT Karlsruher Institut für Technologie Die Forschungsuniversität in der Helmholtz-Gemeinschaft

## PTE Nr. 61

BMWi geförderte FuE-Vorhaben zur "Entsorgung radioaktiver Abfälle"

Berichtszeitraum: 1. Januar - 30. Juni 2021

Projektträger Karlsruhe (PTKA) Entsorgung

Oktober 2021

#### **PTE-Berichte**

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

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

- Entsorgung radioaktiver Abfälle (PTE Nr. x seit 1991, fortlaufend \*)
- Stilllegung und Rückbau kerntechnischer Anlagen (PTE-S Nr. x seit 2001, fortlaufend <sup>#</sup>)
- Nukleare Sicherheitsforschung (PTE-N Nr. x seit 2010, fortlaufend)

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

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

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

<sup>&</sup>lt;sup>#</sup> Bis Ende des Jahres 2016 wurde in dieser Fortschrittsberichtsreihe auch über die BMBF-geförderte FuE zu Stilllegung und Rückbau kerntechnischer Anlagen informiert. Seit 01.10.2016 wird dieser Förderschwerpunkt durch den Projektträger GRS betreut.

#### Vorwort

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

Im Rahmen dieses Auftrages betreut der Projektträger Karlsruhe fachlich und administrativ die vom BMWi im Rahmen des jeweilig gültigen Förderkonzepts geförderten FuE-Vorhaben zur Endlagerung radioaktiver Abfälle. Seit Januar 2021 ist das Projektförderprogramm "BMWi-Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit - Projektförderprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen (2021-2025)" Grundlage der Projektförderung.

Dieses Projektförderprogramm beinhaltet vier Forschungsgebiete: A Reaktorsicherheit, B Verlängerte Zwischenlagerung und Behandlung hochradioaktiver Abfälle, C Endlagerung und D Querschnittsfragen, die von den Projektträgern PT-GRS und PTKA im Auftrag des BMWi betreut werden.

PTKA agiert insbesondere in den Forschungsgebieten C Endlagerung und D Querschnittsfragen, die in folgende sechs FuE-Bereiche aufgeteilt sind, innerhalb derer Projekte gefördert werden können:

FuE-Bereich C1: Standortauswahl

FuE-Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und

(geo-)technische Barrieren

FuE-Bereich C3: Sicherheitsnachweis

FuE-Bereich D1: Wissens- und Kompetenzmanagement FuE-Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen FuE-Bereich D3: Kernmaterialüberwachung (Safeguards)

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

Der Bericht ist wie folgt gegliedert:

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

<u>Teil 2</u>, der Hauptteil, enthält die "formalisierten Zwischenberichte" zu den FuE-Vorhaben, die nach dem <u>Förderkennzeichen</u> geordnet sind. Im Förderkennzeichen bedeuten die Buchstaben

E ⇒ "Entsorgung radioaktiver Abfälle" und

W ⇒ "Kernmaterialüberwachung".

<u>Teil 3</u> listet die FuE-Vorhaben, zugeordnet nach der jeweiligen <u>Forschungsstelle</u>, auf.

## Inhaltsverzeichnis

| 1 | Ver   | zeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche                                | 1     |
|---|-------|---|-------|
|   | C     | Forschungsgebiet Endlagerung  | 1     |
|   | C1    | Standortauswahl   |       |
|   | C2    | Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische |       |
|   |       | Barrieren   | 3     |
|   | C3    | Sicherheitsnachweis   | 7     |
|   | D     | Querschnittsaufgaben  | 11    |
|   | D1    | Wissens- und Kompetenzmanagement  | 11    |
|   | D2    | Sozio-technische Fragestellungen  | 13    |
|   | D3    | Kernmaterialüberwachung (Safeguards)                                    | 15    |
| 2 | For   | malisierte Zwischenberichte   | 17    |
|   | 2.2   | Vorhaben Bereich C  | 17    |
|   | 2.3   | VORHABEN BEREICH D  | 169   |
|   | Infor | mation zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung                 | 195   |
| 3 | Ver   | zeichnis der Forschungsstellen  | . 197 |

## 1 Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche

## C Forschungsgebiet Endlagerung

## C1 Standortauswahl

| 02 E 11637A | Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Model-<br>lierungen zur Charakterisierung des tektonischen<br>Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver<br>Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt A:<br>3D-Spannungsmodell und Aufskalierung | TU Darmstadt   | <b>□</b> 52 |
|-------------|--|--|-------------|
| 02 E 11637B | Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Model-<br>lierungen zur Charakterisierung des tektonischen<br>Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver<br>Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt B:<br>Multiskalenansatz                    | Helmholtz-Zentrum<br>Potsdam Deutsches<br>GeoForschungsZent-<br>rum GFZ, Potsdam | <b>1</b> 54 |
| 02 E 11637C | Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Model-<br>lierungen zur Charakterisierung des tektonischen<br>Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver<br>Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt C:<br>Geomechanik von Sedimentbecken       | Karlsruher Institut<br>für Technologie<br>(KIT)                                  | <b>□</b> 56 |
| 02 E 11829  | Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)   | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln   | 106         |

# C2 Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren

| 02 E 11577A | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A  | BGE Technology<br>GmbH, Peine  | <b>4</b> 34 |
|-------------|--|--|-------------|
| 02 E 11577B | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B  | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln | <b>3</b> 6  |
| 02 E 11617A | Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt A   | BGE Technology<br>GmbH, Peine  | <b>46</b>   |
| 02 E 11617B | Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt B   | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln | 48          |
| 02 E 11627  | Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)   | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln | <b>5</b> 0  |
| 02 E 11678  | Untersuchungen zur Vervollständigung von Stoffmodellen für Salz- oder Sorelbeton sowie spezieller lowph und hochdichter bzw. hochfester Betone zum rechnerischen Nachweis der Rissbeschränkung für Bauwerke (UVERSTOFF)  | BGE Technology<br>GmbH, Peine  | <b>1</b> 70 |
| 02 E 11688  | Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen (Salzschnittblöcke III)  | TU Clausthal,<br>Clausthal-Zellerfeld  | <b>1</b> 72 |
| 02 E 11698  | Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-<br>chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dich-<br>telemente (THYMECZ)  | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln | <b>4</b> 74 |
| 02 E 11748A | Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktions-<br>nachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsge-<br>stützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III:<br>Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injekti-<br>onsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teil-<br>projekt A | TU Clausthal,<br>Clausthal-Zellerfeld  | <b>1</b> 76 |

| 02 E 11748B | Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt B | Helmholtz-Zentrum<br>Dresden-Rossendorf<br>e. V., Dresden   | 78          |
|-------------|---|---|-------------|
| 02 E 11749  | Weiterentwicklung der Konzepte der Transport- und<br>Einlagerungstechnik von Endlagerbehältern (TREND)  | BGE Technology<br>GmbH, Peine   | ₩ 80        |
| 02 E 11759A | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt A   | Friedrich-Schiller-<br>Universität Jena   | <b>2</b> 82 |
| 02 E 11759B | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt B   | Sondervermögen<br>Großforschung beim<br>Karlsruher Institut<br>für Technologie<br>(KIT), Eggenstein-<br>Leopoldshafen | <b>Q</b> 84 |
| 02 E 11759C | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt C   | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln  | ₩ 86        |
| 02 E 11769A | Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt A   | Technische Universität Bergakademie<br>Freiberg   | ₩ 88        |
| 02 E 11769B | Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt B   | Helmholtz-Zentrum<br>Dresden-Rossendorf<br>e. V., Dresden   | 90          |
| 02 E 11779  | MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-<br>Endlager im Steinsalz, Qualitätssicherung mit Ultra-<br>schall (MgO-S3)   | Bundesanstalt für<br>Materialforschung<br>und –prüfung<br>(BAM), Berlin   | 92          |
| 02 E 11799A | Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A  | Karlsruher Institut<br>für Technologie<br>(KIT)   | <b>9</b> 94 |
| 02 E 11799B | Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B  | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln  | <b>96</b>   |
| 02 E 11799C | Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C  | Technische Universität Bergakademie<br>Freiberg   | <b>98</b>   |
| 02 E 11819  | Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)   | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln  | <b>104</b>  |
| 02 E 11839  | Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum<br>Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW<br>Endlager in Salzformationen (RANGERS)  | BGE Technology<br>GmbH, Peine   | 108         |

| 02 E 11870A | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A   | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln  | <b>138</b>  |
|-------------|--|---|-------------|
| 02 E 11870B | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B   | Helmholtz-Zentrum<br>Dresden-Rossendorf<br>e. V., Dresden   | □ 140       |
| 02 E 11870C | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C   | Universität Greifs-<br>wald   | <b>142</b>  |
| 02 E 11870D | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D   | TU München  | <b>144</b>  |
| 02 E 11870E | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E   | Leibniz Universität<br>Hannover   | <b>146</b>  |
| 02 E 11870F | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F   | Leibniz Universität<br>Hannover   | <b>148</b>  |
| 02 E 11880  | Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)   | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln  | <b>150</b>  |
| 02 E 11900  | Langzeitsicherheit von Verschlusssystemen in<br>Schächten und Rampen im Vergleich<br>(LARYSSA)   | BGE Technology<br>GmbH, Peine   | <b>1</b> 56 |
| 02 E 11911A | Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radio-<br>nuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in gra-<br>nitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validie-<br>rung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-<br>Granit), Teilprojekt A | Helmholtz-Zentrum<br>Dresden-Rossendorf<br>e. V., Dresden   | <b>158</b>  |
| 02 E 11911B | Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radio-<br>nuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in gra-<br>nitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validie-<br>rung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-<br>Granit), Teilprojekt B | Friedrich-Schiller-<br>Universität Jena   | 160         |
| 02 E 11921A | Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von<br>AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen<br>(SEPAM), Teilprojekt A   | Forschungszentrum<br>Jülich GmbH  | □ 162       |
| 02 E 11921B | Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von<br>AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen<br>(SEPAM), Teilprojekt B   | Sondervermögen<br>Großforschung beim<br>Karlsruher Institut<br>für Technologie<br>(KIT), Eggenstein-<br>Leopoldshafen | <b>164</b>  |

## C3 Sicherheitsnachweis

| 02 E 11446A | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A   | Dr. Andreas Hampel,<br>Mainz   | <b>□</b> 18 |
|-------------|--|--|-------------|
| 02 E 11446B | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B   | IfG Institut für Gebirgsmechanik<br>GmbH, Leipzig                              | <b>2</b> 0  |
| 02 E 11446C | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C   | Leibniz Universität<br>Hannover  | <b>22</b>   |
| 02 E 11446D | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D   | TU Carolo-Wilhel-<br>mina zu Braun-<br>schweig                                 | <b>□</b> 24 |
| 02 E 11446E | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E   | TU Clausthal,<br>Clausthal-Zellerfeld  | <b>2</b> 6  |
| 02 E 11466  | Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte<br>Modellierung von Transportprozessen im einschluss-<br>wirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)   | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln | <b>28</b>   |
| 02 E 11557  | Gefügestabilisierter Salzgrusversatz - Phase 2 (GE-SAV II)   | Technische Universität Bergakademie<br>Freiberg                                | <b>3</b> 0  |
| 02 E 11567A | Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur<br>Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulato-<br>ren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische<br>Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim), Teilpro-<br>jekt A | TU Clausthal,<br>Clausthal-Zellerfeld  | 32          |
| 02 E 11607A | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt A   | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln | □ 38        |
| 02 E 11607B | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt B   | Helmholtz-Zentrum<br>Dresden-Rossendorf<br>e. V.                               | 40          |

| 0  | 02 E 11607C        | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt C | Sondervermögen<br>Großforschung beim<br>Karlsruher Institut<br>für Technologie<br>(KIT), Eggenstein-<br>Leopoldshafen | <b>4</b> 2  |
|----|--------------------|--|---|-------------|
| 0  | 02 E 11607D        | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt D | Forschungszentrum<br>Jülich GmbH  | <b>44</b>   |
| 0  | 02 E 11647         | Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der<br>Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru 8)  | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln  | <b>□</b> 58 |
| 0  | 02 E 11658A        | Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und<br>Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im<br>Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt<br>A                               | Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln  | <b>60</b>   |
| 0  | 02 E 11658B        | Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und<br>Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im<br>Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt<br>B                               | BGE Technology<br>GmbH, Peine   | <b>□</b> 62 |
| 0  | 02 E 11668A        | $\label{eq:continuous} Verbundprojekt: Smart-K_d \ in \ der \ Langzeitsicherheits- \\ analyse \ - \ Anwendungen \ (SMILE), \ Teilprojekt \ A$  | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln  | <b>□</b> 64 |
| 0  | )2 E 11668B        | $\label{eq:continuous} Verbundprojekt: Smart-K_d \ in \ der \ Langzeitsicherheits- \\ analyse - Anwendungen \ (SMILE), \ Teilprojekt \ B$  | Helmholtz-Zentrum<br>Dresden-Rossendorf<br>e. V.  | <b>□</b> 66 |
| 0  | <b>2 E 11668</b> C | Verbundprojekt: Smart- $K_d$ in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt C  | Sondervermögen<br>Großforschung beim<br>Karlsruher Institut<br>für Technologie<br>(KIT), Eggenstein-<br>Leopoldshafen | <b>□</b> 68 |
| 0  | 02 E 11809A        | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt A  | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln  | <b>100</b>  |
| 0  | 02 E 11809B        | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B  | Johann Wolfgang<br>Goethe-Universität<br>Frankfurt am Main  | 102         |
| 02 | 2 E 11850A         | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt A   | Helmholtz-Zentrum<br>für Umweltforschung<br>GmbH – UFZ -,<br>Leipzig  | <b>110</b>  |
| 02 | 2 E 11850B         | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt B   | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln  | <b>112</b>  |

| 02 E 11850C | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt C | Technische Universität Bergakademie<br>Freiberg   | <b>114</b> |
|-------------|--|---|------------|
| 02 E 11850D | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt D | TU Clausthal,<br>Clausthal-Zellerfeld   | <b>116</b> |
| 02 E 11850E | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt E | Friedrich-Schiller<br>Universität Jena  | 118        |
| 02 E 11850F | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt F | Sondervermögen<br>Großforschung beim<br>Karlsruher Institut<br>für Technologie<br>(KIT), Eggenstein-<br>Leopoldshafen | ☐ 120      |
| 02 E 11860A | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A                             | Johannes Gutenberg-<br>Universität Mainz  | <b>122</b> |
| 02 E 11860B | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B                             | Helmholtz-Zentrum<br>Dresden-Rossendorf<br>e. V.  | <b>124</b> |
| 02 E 11860C | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C                             | Sondervermögen<br>Großforschung beim<br>Karlsruher Institut<br>für Technologie<br>(KIT), Eggenstein-<br>Leopoldshafen | <b>126</b> |
| 02 E 11860D | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D                             | Universität des Saar-<br>landes   | <b>128</b> |
| 02 E 11860E | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E                             | TU München  | <b>130</b> |
| 02 E 11860F | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F                             | Universität Potsdam   | <b>132</b> |
| 02 E 11860G | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G                             | TU Dresden  | <b>134</b> |
| 02 E 11860H | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H                             | Universität Heidelberg  | <b>136</b> |

| 02 E 11890A | Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A | BGE Technology<br>GmbH, Peine  | □ 152 |
|-------------|---|--|-------|
| 02 E 11890B | Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B | Technische Universität Bergakademie<br>Freiberg                                | □ 154 |
| 02 E 11941  | Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der<br>Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)   | Gesellschaft für An-<br>lagen- und Reaktor-<br>sicherheit (GRS)<br>gGmbH, Köln | 166   |

- D Querschnittsaufgaben
  - D1 Wissens- und Kompetenzmanagement

## D2 Sozio-technische Fragestellungen

| 02 E 11789  | Wegemanagement bei der Entsorgung hoch radioaktiver Abfälle in Deutschland (WERA)  | Öko-Institut. Institut<br>für angewandte Öko-<br>logie e. V.  | □ 170      |
|-------------|--|---|------------|
| 02 E 11849A | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A | TU Clausthal,<br>Clausthal-Zellerfeld   | □ 172      |
| 02 E 11849B | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B | Christian-Albrechts-<br>Universität zu Kiel   | □ 174      |
| 02 E 11849C | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C | Freie Universität<br>Berlin   | <b>176</b> |
| 02 E 11849D | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D | Sondervermögen<br>Großforschung beim<br>Karlsruher Institut<br>für Technologie<br>(KIT), Eggenstein-<br>Leopoldshafen | <b>178</b> |
| 02 E 11849E | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E | Sondervermögen<br>Großforschung beim<br>Karlsruher Institut<br>für Technologie<br>(KIT), Eggenstein-<br>Leopoldshafen | <b>180</b> |
| 02 E 11849F | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F | Leibniz Universität<br>Hannover   | <b>182</b> |
| 02 E 11849G | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G | Öko-Institut. Institut<br>für angewandte Öko-<br>logie e. V.  | <b>184</b> |
| 02 E 11849H | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H | TU Berlin   | <b>186</b> |
| 02 E 11849I | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I | TU Carolo-Wilhel-<br>mina zu Braun-<br>schweig  | <b>188</b> |
| 02 E 11849J | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J | Universität Kassel  | <b>190</b> |

### D3 Kernmaterialüberwachung

02 W 6279 Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)

Forschungszentrum Jülich **192** 

## 2 Formalisierte Zwischenberichte

2.1 Vorhaben Bereich C1 – C3

| Zuwendungsempfänger:   |   | Förderkennzeichen: |
|--|---|--------------------|
| Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 M  | Or. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz |                    |
| Vorhabensbezeichnung:  |   |                    |
| Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellie- |   |                    |
| rung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A                      |   |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle         |   |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |   |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra                                      | um:                |
| 01.04.2016 bis 30.09.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021                           |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:                                      |                    |
| 723.810,00 EUR   | Dr. Hampel  |                    |

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 Salzschichten 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 (Wechsellagerung)

Der Zuwendungsempfänger (ZE) 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).

Im Berichtszeitraum untersuchte der ZE mit seinem CDM Einflüsse diverser Modellierungsvarianten auf Ergebnisse von Simulationsberechnungen. Der ZE verglich u. a. Einflüsse einer im Spannungsraum durch Null mit einer nicht durch Null gehenden Dilatanzgrenze, d. h. ob bei (nahezu) einaxialer Belastung auch bei sehr kleinen Differenzspannungen eine Schädigungsentwicklung berücksichtigt werden muss. In einaxialen Laborversuchen wird bei Belastungen unter 5 MPa aufgrund sehr kleiner Kriechraten meist keine Schädigung beobachtet. Theoretisch ist allerdings zu erwarten, dass bei Langzeitvorhersagen die Berücksichtigung einen nennenswerten Unterschied in der Schädigungszone, d. h. im Nahbereich eines untertägigen Hohlraums, ausmacht. Ferner untersuchte der ZE den Einfluss schädigungsabhängiger bzw. nicht schädigungsabhängiger elastischer Moduln und den Einfluss einer stark erhöhten Schädigungsentwicklung bei Zugspannungen gegenüber derjenigen bei Druckspannungen. Schließlich entwickelte der ZE die Modellierung des Einflusses richtungsabhängiger Schädigung auf die Verformungskomponenten mit seinem CDM weiter. Für die Studien führte der ZE wiederholt Berechnungen der beiden Virtuellen Demonstratoren (VD) aus AP5 durch. Der erste VD zeigt den Rückgang der Schädigung und Dilatanz im Konturbereich einer Strecke nach dem Einbau eines Dammbauwerks nach 30 Jahren. Mit dem zweiten VD wird die Entwicklung einer starken Schädigung im Saum um eine Strecke herum und unter dem Einfluss einer Grenzfläche über der Firste (z. B. einer Tonschicht) berechnet. Mit den Studien lassen sich die verschiedenen Einflüsse besser abschätzen.

Aufgrund der COVID-19-Pandemie konnten im Berichtszeitraum keine persönlichen Treffen der Projektpartner stattfinden. Abstimmungen zwischen den Projektpartnern sowie Präsentationen und Diskussionen der Ergebnisse erfolgten in Videobesprechungen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im Vordergrund der weiteren Arbeiten steht die Weiterentwicklung der Modellierung des Kriechens bei kleinen Differenzspannungen auf der Basis der neuen Laborversuchsergebnisse des IfG im AP1. Die Auswirkungen werden wieder mit Berechnungen der beiden Virtuellen Demonstratoren im AP5 untersucht.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederik                                       | enstr. 60,                | 02 E 11446B        |
| 04279 Leipzig  |                           | 02 E 11440B        |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |
| Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellie- |                           |                    |
| rung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B                      |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle         |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:         |                    |
| 01.04.2016 bis 31.03.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 1.005.576,00 EUR   | Dr. Lüdeling              |                    |

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, 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, hier fokussiert auf die flache Lagerung. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und Insitu-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand komplexer gebirgsmechanischer 3D-Modelle in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben "Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschichten 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 (Wechsellagerung)

Die Projektworkshops 24 bis 29 fanden im Berichtszeitraum online statt. Das Projekt WEIMOS wurde im Frühjahr 2021 kostenneutral um sechs Monate (bis zum 31.03.2022) verlängert.

Im Zentrum der numerischen Arbeiten stand der zweite virtuelle Demonstrator, der insbesondere die Konturschädigung an einer Strecke aufzeigen soll, deren Geologie und -metrie sich an die WIPP Site anlehnt.

Das IfG hat dazu Berechnungen mit den Stoffmodellen nach Günther-Salzer und nach Minkley durchgeführt. Die Parameter konnten den Untersuchungen an WIPP-Salz aus den früheren Verbundprojekten zum Stoffmodellvergleich entnommen werden. Mit beiden Stoffmodellen zeigt sich intensive Schädigung, insbesondere an der Firste. Dabei wirken Scher- und Zugschädigung gemeinsam und erzeugen einen entspannten Bereich entlang von Firste, Stoß und auch Sohle, und damit einhergehend einen näherungsweise kreisförmigen Tragring im Gebirge. Die Verschiebungen von Stoff und Firste liegen mit mehreren Dezimetern in einem Bereich, der bei ähnlichen Situationen beobachtet wird. (Für die zugrundeliegenden Hauptstrecken der WIPP liegen keine unmittelbar vergleichbaren Daten vor, da die Firste durch umfassende Ankerung und die Stöße durch mehrmaligen Nachschnitt gesichert wurden. Bei einer Befahrung im Frühjahr 2018 konnte jedoch die Ausbildung von Scherzonen und Zugrissen in der Firste deutlich beobachtet werden.)

Bei den Berechnungen mit dem Minkley-Modell konnte auch die Auswirkung der im Verlauf des Projektes modifizierten Zugmodellierung (Aufteilung der plastischen Korrektur zwischen Scherund Zugverformung) demonstriert werden: Die neue Modellierung intensiviert die Zugschädigung und kann die Ausbildung von firstparallelen Zugrissen reproduzieren.

Im AP1 wurde der Langzeittemperaturwechselversuch TCC34 fortgesetzt. Die aktuelle Laststufe von 4 MPa bei 333 K (nach einer Phase isotroper Belastung) zeigt wie die früheren Last- und Temperaturstufen einen nahezu linearen Verlauf der Verformung über der Zeit; die Steigung ist im Rahmen der Messgenauigkeit identisch zu zwei früheren Phasen mit gleichen Randbedingungen. Dieses Ergebnis bestätigt also die zugrundeliegende Vorstellung, dass die Mikrostruktur nur schwach von der Temperatur abhängt und die vorgestellte Versuchsführung daher geeignet ist, in vertretbarer Zeit verlässliche Daten zum stationären Kriechen zu erhalten.

Die Probleme bei den neuartigen Kriechständen wurden weiter untersucht. Durch gezielte Variation der Randbedingungen konnte gezeigt werden, dass die Temperatur im Versuchsraum einen inakzeptabel großen Einfluss auf das gemessene Signal hat. Der Störmechanismus wird derzeit untersucht.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im Rahmen des Laborprogramms ist vordringlich der Störmechanismus der neuartigen Kriechstände aufzuklären (z. B. thermische Ausdehnung im Versuchstand oder eine Rückwirkung auf die Regelung der Zelle). Im Ergebnis können dann die bisherigen Versuche neu bewertet werden; ggf. sind noch kurze Versuche in der Projektlaufzeit möglich. Der Projektpartner TU Clausthal hat neue Ergebnisse zur Verheilung vorgestellt, die jedoch aufgrund der hohen Verformungen des WIPP-Salzes nur begrenzt aussagekräftig sind.

Bei Langzeitversuch TCC34 ist vorgesehen, die Temperatur wieder in Schritten von  $20\,^{\circ}$ C anzuheben, so dass schlussendlich jede Temperatur-Spannungs-Bedingung einmal in abkühlender und einmal in aufheizender Richtung angefahren wurde.

Die numerischen Arbeiten konzentrieren sich auf den Virtuellen Demonstrator, um in Hinblick auf den Projektabschluss die mit den Partnern abgesprochenen Referenzfälle zu bearbeiten.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover   |                           | 02 E 11446C        |
| Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C |                           |                    |
| <b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.04.2016 bis 31.03.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 526.725,00 EUR   | Dr. Zapf                  |                    |

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 "Konzept-entwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschichten 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 (Wechsellagerung)

In dem Berichtszeitraum hat der Zuwendungsempfänger (ZE) seine Stoffmodellparameter zur Beschreibung des Schädigungs- und Verheilungsverhaltens von Steinsalz weiter verfeinert und die Nachberechnungen noch genauer an die Versuchsergebnisse aus den Verheilungsversuchen angepasst. Mit dem neuen Kennwertsatz hat der ZE weitere Simulationsberechnungen zum virtuellen Demonstrator sowie zum virtuellen Demonstrator II durchgeführt.

Aufgrund der COVID-19-Pandemie konnten im Berichtszeitraum keine persönlichen Treffen der Projektpartner stattfinden. Abstimmungen zwischen den Projektpartnern sowie Präsentationen und Diskussionen der Ergebnisse erfolgten in Videobesprechungen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Geplant sind weitere Untersuchungen am virtuellen Demonstrator II sowie ein Vergleich der Berechnungsergebnisse aus den Simulationsberechnungen zum virtuellen Demonstrator I mit denen aus den Simulationsberechnungen zum virtuellen Demonstrator II. Die Ergebnisse sollen in den geplanten Online-Workshops vorgestellt und mit den Projektpartnern diskutiert werden.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Bra  | unschweig,                | 02 E 11446D        |
| Universitätsplatz 2, 38106 Braunschweig  |                           | 02 E 11440D        |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |
| Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellie- |                           |                    |
| rung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D                      |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle         |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:         |                    |
| 01.04.2016 bis 31.03.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 427.816,00 EUR   | Prof. Dr. Stahln          | nann               |

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 Salzschichten 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 (Wechsellagerung)

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

Im Berichtszeitraum wurden umfassende Berechnungen an dem Modell des zweiten Virtuellen Demonstrators durchgeführt. Bei dem Vergleich der Ergebnisse der Projektpartner untereinander zeigt sich, dass mit einigen Stoffmodellen, so auch mit dem vom ZE verwendeten Stoffmodell TUBSsalt, vergleichsweise geringe Werte für die schädigungsinduzierte Volumendehnungen berechnet werden. Hier sind weitere Untersuchungen und ggf. Anpassungen am Stoffmodell vorzunehmen. Am Modell des ersten Virtuellen Demonstrators wurden weitere Berechnungen mit einem, durch Andreas Hampel definierten, für alle Projektpartner einheitlichem Satz an Randbedingungen und Parametern durchgeführt. Hier sind weitere Untersuchungen im Hinblick auf die berechneten, im

Im Berichtszeitraum konnten aufgrund der COVID-19-Pandemie keine persönlichen Treffen stattfinden. Die Abstimmung zwischen den Projektpartnern erfolgte in Form von virtuellen Workshops. Aufgrund des digitalen Formats konnte allerdings eine erhöhte Anzahl (13.01.21, 10.02.21, 10.03.21, 12.04.21, 27.05.21) an Workshops stattfinden.

Vergleich zu den Ergebnissen der Projektpartner, hohen Verheilungsraten vorzunehmen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Sobald die Langzeitkriechversuche im AP1 abgeschlossen sind, ist die Auswertung der Versuche sowie die Umsetzung in der Weiterentwicklung des Stoffmodells vorgesehen.

Im Vordergrund der weiteren Arbeiten im AP5 werden weitere Berechnungen mit dem ersten und dem zweiten Virtuellen Demonstrator stehen.

Sofern aufgrund der COVID-19-Pandemie weiterhin keine persönlichen Treffen stattfinden können, werden weitere digitale Workshops geplant. Sobald Präsenzveranstaltungen wieder durchführbar sind, wird ein Treffen am IfG in Leipzig angestrebt.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer  | -Str. 2a, 38678           | 02 E 11446E        |
| Clausthal-Zellerfeld   |                           | 02 E 11440E        |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |
| Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellie- |                           |                    |
| rung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E                      |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle         |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:         |                    |
| 01.04.2016 bis 31.03.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 784.171,00 EUR   | Prof. Dr. Lux             |                    |

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 Salzschichten 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 (Wechsellagerung)

Aufgrund der COVID-19-Pandemie führten die Projektpartner im Berichtszeitraum am 13. Januar, 10. Februar, 10. März, 12. April und 27. Mai die Projekt-Workshops 24 bis 28 online durch. Auf den Projekt-Workshops stellte der Zuwendungsempfänger aktuelle Projektthemen mit Fokussierung auf Arbeiten in AP2 und AP5 vor.

Aufgrund der Mutterschaft der Projektbearbeiterin des Zuwendungsempfängers stand beim Zuwendungsempfänger von März bis Juli 2021 temporär kein wissenschaftlicher Mitarbeiter zur Bearbeitung des Projektes zur Verfügung. Daher mussten die vorgesehenen Arbeiten wie folgt angepasst werden:

Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten des Zuwendungsempfängers im Bereich der in AP2 vorgesehenen laborativen Untersuchungen kontinuierlich fortgeführt. Dabei wurden vom Zuwendungsempfänger im Berichtszeitraum die Serien 4d) und 4e) mit jeweils vier Verheilungsversuchen durchgeführt (Schädigungsphase unter 30/5 MPa und Verheilungsphase unter 15/14 MPa). Zur Untersuchung des Einflusses der Temperatur auf die Schädigungsrückbildung im Steinsalz wurde die Serie 4d) mit einer erhöhten Versuchstemperatur von 70 °C durchgeführt. Die Serie 4e) wurde anschließend wieder bei einer Versuchstemperatur von 35 °C durchgeführt, wobei allerdings die mechanische Belastungsgeschichte aus der Serie 4d) übernommen wurde. In der Serie 4e) wurden gleichzeitig auf den 4 Versuchsanlagen jeweils 2 Wipp-Salzprüfkörper und 2 Asse-Salzprüfkörper untersucht, um den Einfluss der jeweiligen Steinsalz-Fazies auf die Schädigungsrückbildung zu analysieren. Es hat sich allerdings gezeigt, dass die gleichzeitige Untersuchung von Steinsalzprüfkörpern mit sehr unterschiedlichem Deformationsverhalten zu unerwarteten Problemen bei der Steuerung der Versuchsanlagen führen kann. Die aus den Serien 4d) und 4e) erhaltenen Laborergebnisse wurden von dem Zuwendungsempfänger bei den verschiedenen Projekt-Workshops vorgestellt und diskutiert.

Die in AP5 vorgesehenen numerischen Untersuchungen wurden im Berichtszeitraum unterbrochen. Es wurden alle bisher vom Zuwendungsempfänger im Projekt erbrachten Leistungen in Form eines Abschlussberichts festgehalten.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Idee, in den vier Versuchsanlagen gleichzeitig jeweils 2 Wipp-Salzprüfkörper und 2 Asse-Salzprüfkörper zu untersuchen, erschien vielversprechend, jedoch ist im Nachhinein aufgrund der aufgetretenen Probleme bei der Steuerung der Versuchsanlagen unklar, ob die erhaltenen Laborergebnisse zur Dilatanzentwicklung zuverlässig sind oder nicht. Die messtechnische Erfassung der Dilatanzentwicklung von vier Prüfkörpern mit einer einzigen EMC-Anlage erscheint nunmehr bei gleichzeitiger Untersuchung von Prüfkörpern mit sehr unterschiedlichem Deformationsverhalten weniger praktikabel. Aus diesem Grund ist für einen vertieften Vergleich der Schädigungsrückbildungseigenschaften von Asse-Salz und Wipp-Salz die Untersuchung einer Serie 4f) vorgesehen, bei der dann alle 4 Prüfkörper aus der Wipp-Lokation stammen. Die Serie 4f) wird bei einer Versuchstemperatur von 35 °C durchgeführt.

Die weitere Projektbearbeitung erfolgt ab August 2021 durch einen anderen wissenschaftlichen Mitarbeiter des Zuwendungsempfängers.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:  |                           | Förderkennzeichen: |
|---|---------------------------|--------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln  |                           | 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 C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.3  |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.04.2016 bis 31.03.2022   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                    |
| 2.758.255,00 EUR  | Reiche                    |                    |

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 zugrundeliegende 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 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 werden in allen Programmentwicklungsphasen durchgeführt. Die folgenden QS-Maßnahmen werden umgesetzt: Standardisierung der Arbeitsprozesse, Versions- und Konfigurationsmanagement, Release-Freigabe, 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

In dem zu berichtenden Zeitraum wurde im Wesentlichen an den Arbeitspaketen 2, 3 und 4 gearbeitet.

AP1: Anforderungen an die Erweiterungen für die grafische Benutzeroberfläche XENIA wurden formuliert. Dabei handelt es sich insbesondere um die sogenannten bedingten Attribute, die im Kontext von bestimmten Bedingungen stehen.

Fa. BREDEX wurde mit der Umsetzung von neuen Anforderungen an XENIA beauftragt.

AP2: Es wurde das Konzept zur Bilanzierung eines allgemeinen Mehrphasen-Mehrkomponenten-Systems ausgearbeitet und zur daraus folgenden Basisgleichung für zwei Basiskomponenten Lösung und Gas, die die Gas- und Flüssigphase maßgeblich bilden, ausformuliert. XENIA-Module, die für die Definition eines Nahfeld-Rechenlaufs erforderlich sind, wurden weiterentwickelt.

AP3: Die Umsetzung von bereits existierenden Konzepten wurde fortgesetzt.

Speziell folgende Konzepte wurden umgesetzt:

- Gleichungssystem für ein Zweiphasen-Zweikomponenten-System (alternativ zu Phasen- und Transportgleichungen) für zwei Hauptkomponenten Lösung und Gas, die die Gas- und Flüssigphase maßgeblich bilden.
- Berechnung in Abhängigkeit von solchen Systemparametern wie Temperatur und Druck von
  - Henry-Koeffizienten (Phasenwechsel),
  - Viskosität und Dichte der Gasphase bestehend aus zwei Basiskomponenten,
  - Dampfsättigungsdruck.

Im Rahmen der Codepflege bereits vorhandener Datenstrukturen in NaTREND wurden einige Korrekturen und Erweiterungen vorgenommen. Dabei wurden u. a. einige mit C++20 zur Verfügung stehende neue Funktionalitäten integriert.

AP4: Als eine wichtige QS-Maßnahme erfolgte der Umstieg vom Versionsmanagementsystem Subversion auf das zeitgemäße Git.

Es wurden umfangreiche Vergleichsrechnungen insbesondere bezüglich des Basisprozesses Zwei-Phasen-Fluss durchgeführt. Die vorhandene Bibliothek von automatischen Testfällen wurde entsprechend der aktuellen Entwicklung angepasst und durch neue Testfälle erweitert. Die entwickelten Konzepte, die zugrunde liegenden Entscheidungen sowie der Projektfortschritt wurden dokumentiert.

AP6: Der vorliegende Bericht wurde erstellt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Halbjahr soll überwiegend an AP3 und AP4 gearbeitet werden, wobei der Schwerpunkt bei der Umsetzung des Schadstofftransports liegen soll.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6,                  |                           | 02 E 11557         |
| 09599 Freiberg   |                           | 02 E 11337         |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |
| Gefügestabilisierter Salzgrusversatz - Phase 2 (GESAV II)                      |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2                                     |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:         |                    |
| 01.05.2017 bis 30.04.2021  | 01.01.2021 bis 30.04.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 962.943,33 EUR   | Prof. Dr. Misch           | 10                 |

Im vorangegangen Forschungsprojekt GESAV I wurde eine Rezeptur für einen gefügestabilisierten Salzgrusversatz entwickelt, mit dem nach dem Einbau ein praktisch 100 %-iger Verfüllungsgrad erreicht werden kann. Aufgrund der Gefügestabilisierung wird eine ausreichend hohe Stützwirkung des Versatzes erreicht, so dass nachfolgende Auflockerungen (Rissbildungen) im umliegenden Gebirge ausgeschlossen werden können. Die Anfangspermeabilität des Versatzmaterials liegt bei <  $10^{-11}$  m². Die Parameter Verformungswiderstand und Permeabilität verbessern sich mit zunehmender Gebirgskonvergenz. Die Rezeptur des entwickelten Versatzmaterials wurde unter der Patentnummer DE 10 2015 005 288 patentiert.

Das FuE-Projekt GESAV II verfolgt das Ziel, eine optimale Einbautechnologie für die patentierte Rezeptur zu entwickeln. Zum Einbringen von Salzgrusversatz im Endlagerbergbau kommen mechanischer (Schleuder-) und pneumatischer (Blas-) Versatz infrage. Mit beiden Verfahren wird nach dem Stand der Technik je ein Referenzversatzkörper in der Grube Sondershausen der GSES mbH erstellt. Aufbauend auf den Ergebnissen von In-situ-Messungen an den Versatzkörpern und Laboruntersuchungen von entnommenen Probekörpern werden die Verfahren optimiert. Wesentliche Optimierungsparameter sind die Einbaudichte und die Reduzierung technologiebedingter Einflüsse auf das. Mit optimierten Versatzverfahren wird jeweils ein weiterer Versatzkörper erstellt. Aus der vergleichenden Untersuchung der Versatzkörper wird eine Vorzugsvariante zum Einbauverfahren benannt.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP7: Pilotversuche zum Einbau

AP8: Labor- und messtechnische Überwachung der Versatzkörper

AP9: Nachuntersuchungen des Versatzkörpers AP10: Abschlussbericht zum Gesamtvorhaben

AP7: Großversuche abgeschlossen.

AP8: Fortgesetzte kontinuierliche messtechnische Überwachung Versatzkörper III und IV und geochemische Überwachung aller Versatzkörper.

AP9: Untersuchung der Proben von Versatzkörper III am IfG Leipzig gem. Untersuchungsprogramm. Durchführung der Versuche zur geochemischen Quantifizierung des Phasenbestands am IfAC im Rahmen der kostenneutralen Verlängerung. Abschluss der Setzung-Feuchtigkeits-Verlaufsversuche am IfBuS.

AP10: Erstellung des Abschlussberichtes.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP7: Großversuche abgeschlossen.

AP8: Keine. AP9: Keine.

AP10: Erstellung des Abschlussberichts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Artikel: "Langzeitsicherheit im Bergwerk Glückauf Sondershausen" in Bergbau 05/21 Vortrag: "Investigations on in-situ material behavior of matrix-stabilized crushed rock salt backfill under consideration of different filling technologies. Review of the GESAV II Project." auf 11<sup>th</sup> US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation (17.06.2021, online)

| Zuwendungsempfänger:  |                           | Förderkennzeichen: |
|---|---------------------------|--------------------|
| Technische Universität Clausthal, Adolf-Römer-Str. 2a, 38678  |                           | 02 E 11567A        |
| Clausthal-Zellerfeld  |                           | 02 E 1130/A        |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                    |
| Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur  | Verifizierung u           | nd Validierung von |
| TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersys- |                           |                    |
| temen (BenVaSim), Teilprojekt A   |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle                      |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.3  |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.05.2017 bis 31.03.2021   | 01.01.2021 bis 31.03.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                    |
| 537.360,00 EUR  | Prof. Dr. Lux             |                    |

Bei dem Forschungsvorhaben "BenVaSim" handelt es sich um ein internationales Simulatoren-Benchmarking-Projekt, dessen Ziel es ist, die numerisch korrekte und geotechnisch grundsätzlich aussagekräftige Funktionsweise unterschiedlicher TH<sup>2</sup>M-Simulationsprogramme zu analysieren. Zu diesem Zweck ist die Simulation von Modellbeispielen unterschiedlichen Komplexitätsgrads mit diesen Simulatoren angedacht. Das übergeordnete Ziel ist dabei die nationale Verfügbarkeit von mehreren qualitätsgesicherten Simulatoren für die Durchführung von fluiddynamischen Analysen zum Verhalten von untertägigen Endlagersystemen im Tonstein- und Salinargebirge als Grundlage für die Erarbeitung von Langzeitsicherheitsanalysen zu Endlagerkonzepten. Das Vorhaben soll in Zusammenarbeit mit der BGR, dem schweizerischen ENSI, der GRS mit ihren Bereichen "Endlagersicherheitsforschung" (

BMWi-FKZ: 02E11567B, Verbundprojekt mit TUC) und "Strahlen- und Umweltschutz" (→ BMUB-FKZ: 3616E03230) sowie dem US-amerikanischen LBNL stattfinden und baut vom Standpunkt des Zuwendungsempfängers TUC aus auf dem BMWi-Forschungsvorhaben mit dem FKZ 02E11041 auf, in dessen Rahmen der FTK-Simulator entwickelt worden ist, der vonseiten der TUC Gegenstand des geplanten Benchmarkings sein wird. Weiterentwicklungen des FTK-Simulators sind ebenfalls im Rahmen dieses Forschungsvorhabens vorgesehen, um eine für die Zielstellung des Benchmarkings erforderliche Vergleichbarkeit der mit den Simulatoren zu generierenden Ergebnisse mit Blick auf relevante, aber bis dato noch nicht vom FTK-Simulator unterstützte Prozesse für Endlagermodelle zu gewährleisten. Vorbereitende Maßnahmen für das Benchmarking sind im Rahmen eines Vorprojekts mit dem BMWi-FKZ 02E11506 erfolgt.

- AP1.1: Organisation und Durchführung von Fachtreffen, grundsätzliche Koordination
- AP1.2: Abstimmung der Berechnungsmodelle, Variationen und Parameter
- AP1.3: Weiterentwicklung des FTK-Simulators inkl. Durchführung von Testsimulationen
- AP1.4: Aufbau der Berechnungsmodelle für die Modellbeispiele aus AP1.2
- AP1.5: Durchführung der FTK-Simulationen und Auswertung der Ergebnisse
- AP1.6: Gegenüberstellung der FTK-Simulationsergebnisse mit den Ergebnissen der Partner
- AP1.7: Vorstellung und Diskussion der Arbeiten im nationalen & internationalen Rahmen
- AP1.8: Dokumentation der Arbeiten, Generalisierung der Befunde, Abschlussbericht

Die letzten drei Monate der Projektlaufzeit sind für die Dokumentation der Projektergebnisse (Schlussbericht des Teilprojekts A sowie Synthesebericht) aufgewendet worden.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Projekt zum 31.03.2021 beendet.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:  |                | Förderkennzeichen:        |  |
|---|----------------|---------------------------|--|
| BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine   |                | 02 E 11577A               |  |
| Vorhabensbezeichnung:   |                | 1                         |  |
| Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin |                |                           |  |
| (SUSE), Teilprojekt A   |                |                           |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle          |                |                           |  |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                                |                |                           |  |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra | um:                       |  |
| 01.06.2017 bis 31.05.2023   | 01.01.2020 bis | 01.01.2020 bis 30.06.2021 |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter: |                           |  |
| 1.078.790,00 EUR  | Dr. Müller     |                           |  |

Grundlage des Projektes SUSE ist die 2001 zwischen dem früheren russischen Ministerium für Atomenergie Minatom (jetzt Rosatom) und dem BMWi getroffene Vereinbarung für eine deutschrussische Kooperation zur internationalen Forschungs- und Entwicklungsarbeit hinsichtlich der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Kristallingesteinen. In den vergangenen 15 Jahren wurden gemeinsame Forschungs- und Entwicklungsarbeiten, die sich auf die Ergebnisse von Erkundungsarbeiten auf mehreren Kristallinstandorten im Nishnekansker Gebiet (nahe Krasnojarsk) stützen und sich seit 2006 auf Untersuchungen des Standortes Yeniseysky konzentrieren, durchgeführt. Im Vorhaben SUSE werden die sicherheitsanalytischen Untersuchungen zu Endlagersystemen in Kristallingesteinen am Standort Yeniseysky weitergeführt. Die Untersuchungen umfassen die Erarbeitung von Verschlusskonzepten, der Charakterisierung der Klüftung kristalliner Gesteine sowie die Durchführung hydrogeologischer Strömungs- und Transportberechnungen. In Abstimmung mit den russischen Kollegen werden zudem Laborexperimente zu den mechanischen Eigenschaften an geklüfteten, wieder mineralisierten Wirtsgesteinen sowie zum Radionuklid-Rückhaltevermögen an kristallinen Kernproben aus dem Untersuchungsgebiet durchgeführt. Aufbauend auf diesen Ergebnissen wird das geologische Standortmodell für das Untersuchungsgebiet Yeniseysky aktualisiert und hinsichtlich des Kluft- und Störungszonennetzwerkes präzisiert.

- AP1: Bemessung des geotechnischen Verschlusssystems
- AP2: Gesteinseignungsklassifikationen als Positionierungskriterien für Dichtelemente, Bohrlöcher und Auffahrungen im Kristallin
- AP3: Charakterisierung eines Kluft- und Störungszonennetzwerkes am Beispiel des Standortes Yeniseysky
- AP4: Erhebung zusätzlicher Daten an Probenmaterial aus dem Gebiet Yeniseysky
- AP5: Regionale 3D-Strömungs- und Transportmodelle
- AP6: Bewertung und Dokumentation
- AP7: Unterstützung bei der methodischen Planung des Untertagelabors und Spezifizierung des In-Situ-Forschungs- und Entwicklungsbedarfs

AP5: Numerische Ansätze zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüfteten Gesteinen sind oft mit unterschiedlichen Annahmen und Vereinfachungen verbunden. Dies führt zu erheblichen Ungewissheiten bei der numerischen Berechnung von Grundwasserströmung und Schadstofftransport. Ziel ist es, durch einen Vergleich mehrerer Modellierungsansätze wesentliche Modellungewissheiten zu charakterisieren, die bei der Implementierung des numerischen Modells aus dem geologischen Modell entstehen und mit dem entsprechenden Modellierungsansatz verbunden sind. Im Berichtszeitraum haben sich die deutschen Projektpartner auf einheitliche Strömungsund Transportberechnungen in Form von Benchmarkberechnungen geeinigt und diese in Berichtsform spezifiziert. Die durchzuführenden Berechnungen unterscheiden sich hauptsächlich in der Anzahl der zu berücksichtigenden Klüfte und in dem zu simulierenden physikalischen Prozess. Die ersten drei Benchmark-Fälle beschränken sich auf advektive Fluidströmungsprozesse, während die letzten drei Fälle zusätzlich konservativen Stofftransport berücksichtigen. Im Rahmen der Benchmarkberechnungen möchte die BGETEC den in der Vergangenheit entwickelten und in die beiden Rechencodes FLAC3D und OGS implementierten Fracture-Continuum-Ansatz verwenden. Zusätzlich ist die Verwendung eines weiteren Modellierungsansatzes in OGS geplant, bei dem Kluftnetzwerke als 2D-Elemente auf ein 3D-Berechnugnsgitter überführt werden. Zu diesem Zweck hat die BGETEC einen deutschen Universitätspartner als Unterauftragnehmer im Rahmen des SUSE Projektes mit der Entwicklung beauftragt.

AP7: Ein Teilziel dieses Arbeitspaketes ist es, die Einsatzmöglichkeit und Zusammenarbeit zwischen den deutschen und russischen Projektpartnern im Hinblick auf die Softwarepakete PULSE und VIRTUS zu diskutieren. Zu diesem Zweck fand am 04.02.2021 online unter Federführung des Projektpartners GRS ein gemeinsames Projekttreffen zum Thema "Virtuell and Augmented Reality" statt, an dem die BGETEC teilgenommen hat. Im Hinblick auf VIRTUS soll der Import und die Visualisierung eines Datensatzes der russischen Partner getestet werden.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP4: Der bisher verwendete Fracture-Continuum(FC)-Ansatz, welcher eine Übertragung der Geometrie des Kluftsystems auf ein Kontinuummodell vorsieht, soll für Strömungs- und insbesondere Transportmodellierungen weiterentwickelt werden. Dazu sollen Überlegungen aus dem in Teilzügen vergleichbaren Oda-Ansatz mit dem FC-Ansatz verknüpft werden.

AP5: Im Rahmen zukünftiger Berechnungen sollen die spezifizierten Benchmarkberechnungen mit den genannten Modellierungsansätzen umgesetzt werden. Dabei ist ein enger Austausch mit dem russischen Projektpartner geplant, die zudem mit eigenen Modellierungsansätzen an den Benchmarkberechnungen mitwirken. Zu diesem Zweck ist auch ein deutsch-russisches Arbeitstreffen für den 27.09.2021 geplant. Mit Hilfe der Benchmarkberechnungen ist es möglich, den Einfluss verschiedener Ansätze auf die Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen zu verdeutlichen und deren Auswirkungen auf die Integritätsanalysen für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in kristallinem Gestein zu ermitteln. Es werden somit Grundlagen geschaffen, um die im Sicherheitsnachweise verlangte Bewertung von Modellierungsungewissheiten abschätzen zu können.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Flügge, J., Hassanzadegan, A., Johnen, M., Müller, Ch., Sönnke, J., Zhao, H.: Safety Analytical Investigations of Repository Systems in Crystalline Rock. Oral presentation. Tage der Standortauswahl, TU Freiberg und online, 11.-12.02.2021

| Auftragnehmer:   |                                    | Förderkennzeichen:        |
|--|------------------------------------|---------------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   | GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln |                           |
| Vorhabensbezeichnung:  |                                    |                           |
| Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuch                               | ungen zu Endlag                    | gersystemen im Kristallin |
| (SUSE), Teilprojekt B  |                                    |                           |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                                    |                           |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                       |                                    |                           |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra                     | um:                       |
| 01.06.2017 bis 31.05.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021          |                           |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:                     |                           |
| 1.704.840,00 EUR   | Dr. Flügge                         |                           |

Im Vorhaben SUSE werden die sicherheitsanalytischen Untersuchungen zu Endlagersystemen in Kristallingesteinen am Standort Jenessieskij weitergeführt. Die Untersuchungen umfassen die Erarbeitung von Verschlusskonzepten, der Charakterisierung der Klüftung kristalliner Gesteine sowie die Durchführung hydrogeologischer Strömungs- und Transportberechnungen. In Abstimmung mit den russischen Kollegen werden zudem Laborexperimente zu den mechanischen Eigenschaften an geklüfteten, wieder mineralisierten Wirtsgesteinen sowie zum Radionuklid-Rückhaltevermögen an kristallinen Kernproben (Gneiss, Dolerit, Kluftminerale) aus dem Untersuchungsgebiet Yeniseysky in Russland durchgeführt. Aufbauend auf diesen Ergebnissen wird das geologische Standortmodell für das Untersuchungsgebiet Yeniseysky aktualisiert und hinsichtlich des Kluft- und Störungszonennetzwerkes präzisiert. Auf dieser Grundlage werden mit den Programmen d³f++ und RepoTREND Strömungs- bzw. Transportmodelle aufgebaut und Berechnungen durchgeführt.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP1: Bemessung des geotechnischen Verschlusssystems
- AP2: Gesteinseignungsklassifikationen als Positionierungskriterien für Dichtelemente, Bohrlöcher und Auffahrungen im Kristallin
- AP3: Charakterisierung eines Kluft- und Störungszonennetzwerkes am Beispiel des Standortes Yeniseysky
- AP4: Erhebung zusätzlicher Daten an Probenmaterial aus dem Gebiet Yeniseysky
- AP5: Regionale 3D-Strömungs- und Transportmodelle
- AP6: Bewertung und Dokumentation
- AP7: Unterstützung bei der methodischen Planung des Untertagelabors und Spezifizierung des Insitu-Forschungs- und Entwicklungsbedarfs

Die GRS ist federführend in den AP4 und AP5.

Die Zusammenarbeit mit den russischen Projektpartnern musste auch zu Beginn des Jahres 2021 weiterhin online erfolgen. Zur fachlichen Diskussion von Arbeitsergebnissen und zur Abstimmung der geplanten Arbeiten wurden mehrere virtuelle Besprechungen abgehalten, z. B. Diskussion der GRS Ergebnisse aus den Laborversuchen mit NO.RAO, IBRAE, IGE RAN, IGEM RAN am 22.01.2021, Diskussion zu Erkundung/URL/Modellentwicklung mit IBRAE & NO.RAO am 28.01.2021, Diskussion der Zusammenarbeit auf dem Gebiet PULSE/VIRTUS am 04.02.2021. Treffen zwischen den deutschen Partnern zur Diskussion der Grundwasserströmungs- und Transportmodelle fanden am 07.05.2021 und am 21.05.2021 statt.

- AP4: Die Probenaufschlüsse zwecks Bestimmung der K<sub>d</sub>-Werte für Cs, Sr, Ba, Ni, Eu, Sm, Gd, Nd, I, Se und U wurden mit der 18 % HCl und Königswasser durchgeführt. Da die aufgeschlossenen Mengen an diesen Spurenelementen allerdings zu hoch waren, sollen als Bezugswerte für die K<sub>d</sub>-Bestimmung entsprechend einer erweiterten Literaturrecherche die mit der 0,1 N HCl extrahierten Mengen verwendet werden. Eine entsprechende Batchreihe wurde gestartet. Die Ergebnisse der Quelldruck- und Permeabilitätsversuche mit einem russischen Bentonit wurden in der Fachzeitschrift "Minerals" veröffentlicht.
- AP5: Für den qualitativen und quantitativen Vergleich der verschiedenen Ansätze zur modelltechnischen Abbildung von Klüften hinsichtlich der Vorgehensweise bei einer numerischen Modellbildung wurden weiterführende Rechnungen auf der Basis eines vorher festgelegten kleinräumigen Würfelmodells mit einer bzw. mehreren Klüften von BGETEC und GRS durchgeführt und diskutiert. GRS verwendet für die weiteren Rechnungen den Oda-Ansatz, bei dem die Permeabilitäten des Kluftnetzwerkes aus einem DFN-Modell auf ein gleichmäßiges Gitter übertragen werden. Eine Beschreibung verschiedener Testfälle für die Benchmarkrechnungen wurde gemeinsam von BGETEC und GRS ausgearbeitet. Im Hinblick auf die Überprüfung der Anwendungsmöglichkeit der in SUSE entwickelten Strömungsmodelle im Hinblick auf Transportberechnungen wurden relevante Parameter zusammengestellt und diskutiert.
- AP7: Ein russisch-deutsches Projekttreffen zu "Virtuell and Augmented Reality" fand virtuell am 4. Februar 2021 statt. Hierbei wurden aktuelle und vergangene Arbeiten beider Seiten vorgestellt und ein möglicher Datenaustausch diskutiert. Am 25. Juni 2021 wurde ein Beispieldatensatz von russischer Seite an die GRS übermittelt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Ein russisch-deutsches Arbeitstreffen (online) mit allen involvierten Partnern ist für 27.09.2021 geplant sowie eine Teilnahme am "Arbeitstreffen im Rahmen der russisch-deutschen Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Endlagerung radioaktiver Abfallstoffe" am 05. und 06.10.2021 in Moskau.

- AP4: Weitere experimentelle Arbeiten zur Bestimmung der K<sub>d</sub>-Werte werden derzeit mit der Gruppe von Viktoria Krupskaya (IGEM RAN) abgestimmt.
- AP5: Übersendung der Benchmarkbeschreibung an die russischen Partner, Durchführung der Benchmark-Modellrechnungen. Weiterführung der grundlegenden Arbeiten zur Erweiterung des Ansatzes im Hinblick auf Transportmodellierungen.
- AP7: Auswertung des an GRS übermittelten Datensatzes mit VIRTUS.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Flügge, J., Hassanzadegan, A., Johnen, M., Müller, Ch., Sönnke, J., Zhao, H.: Safety Analytical Investigations of Repository Systems in Crystalline Rock. Oral presentation. Tage der Standortauswahl, TU Freiberg und online, 11.-12.02.2021

Meleshyn, A., Zakusin, S., Krupskaya, V.: Swelling pressure and permeability of compacted bentonite from 10th Khutor deposit (Russia). Minerals 2021, 11(7), 742; https://doi.org/10.3390/min11070742

| Auftragnehmer:   |                   | Förderkennzeichen:   |
|--|-------------------|----------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   |                   | 02 E 11607A          |
| Vorhabensbezeichnung:  |                   |                      |
| Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und .                             | Aktivierungspro   | dukte im Nahfeld von |
| Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Mö                               | glichkeiten ihrei | Rückhaltung (VESPA   |
| II), Teilprojekt A   |                   |                      |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                   |                      |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1                                     |                   |                      |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra    | um:                  |
| 01.10.2017 bis 30.06.2022  | 01.01.2021 bis    | 30.06.2021           |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:    |                      |
| 1.107.813,00 EUR   | Dr. Hagemann      |                      |

Primäres Ziel des Verbundvorhabens VESPA II ist, das Verständnis der Lösungseigenschaften und der Rückhaltung von mobilen Spalt- und Aktivierungsprodukten besonders unter reduzierenden Bedingungen entscheidend zu verbessern.

Ziel des GRS-Teilprojekts VESPA II ist, ein polythermes thermodynamisches Modell zur Beschreibung der Aktivitäten von gelösten Selenspezies unter reduzierenden Bedingungen zu entwickeln.

Darüber hinaus wird die chemische Reaktion von oxidierten Selenspezies bei Fe-Korrosion untersucht, die Lösungseigenschaften von Selenit und Iodid bei Temperaturen über 25 °C werden ermittelt bzw. prognostiziert sowie geochemische Referenzszenarien für potentielle Endlagerstandorte in deutschen Tonstein- und Steinsalzformationen entwickelt.

- Speziation und Thermodynamik von Spaltprodukten in salinaren Lösungen
- Untersuchung der Rückhaltung von oxidierten Selenspezies beim Kontakt mit Fe(II)-haltigen Korrosionsprodukten
- Geochemische Systemzustände im Nahfeld
- Vergleichende Modellierung der Ausbreitung und Rückhaltung von langlebigen Spalt- und Aktivierungsprodukten
- Projektmanagement und Projektcontrolling

Die zuvor begonnenen isopiestischen Messungen an Kaliumselenit-Lösungen wurden fortgesetzt. Sie vervollständigten die bisherigen Ergebnisse bei 25 °C. Für 40 °C konnten die bisher vorhandenen, wenigen Daten erfolgreich ergänzt werden. Einige zusätzliche Messpunkte bei 60 °C fügen sich gut in frühere Messreihen ein. Die Gesamtheit der Messwerte ergibt im Gegensatz zu früheren Untersuchungen ein konsistentes Bild und lässt nun die Ableitung eines verbesserten Aktivitätsmodells für K<sub>2</sub>SeO<sub>3</sub> zu.

Kalorimetrische Messungen der Verdünnungsenthalpie von MgI<sub>2</sub>-Lösungen konnten wegen technischer Störungen am Kalorimeter nur in geringem Umfang fortgeführt werden. Die erhaltenen Messreihen bei 40 °C fügen sich gut in die bislang nur für 25 °C vorliegenden Resultate ein.

Im Berichtszeitraum wurden die Versuche zur Bestimmung des Reduktionsverhaltens von Se in salinaren Lösungen geplant und angesetzt. Die Untersuchungen sollen zeigen, unter welchen Bedingungen und mit welcher Geschwindigkeit Selenit und Selenat durch Reaktion mit metallischem Eisen sowie Fe(II)-haltigen Korrosionsprodukten (Hibbingit, Chukanovit) reduziert werden.

Es wurde damit begonnen, plausible Randbedingungen für geochemische Systemzustände im Nahfeld eines Endlagers zusammenzustellen. Diese umfassen u. a. die Massen der eingesetzten Materialien, Korrosionsfortschritt und Korrosionsphasen, Lösungszusammensetzung sowie Temperatur und Gasdruck.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Aufgrund pandemiebedingter Einschränkungen musste der Aufbau des Messsystems zur Untersuchung der Speziation von Seleniden erneut verschoben werden. Diese Arbeiten sind nun für das zweite Halbjahr 2021 geplant.

Mit der Titrationskalorimetrie werden Verdünnungsenthalpien von MgI<sub>2</sub> für 40 °C und eine weitere, höhere Temperatur bestimmt.

Die Versuche zur Reduktion von Selenit und Selenat werden fortgeführt und zunächst der zeitliche Verlauf der Se-Konzentration beobachtet.

Ableitung plausibler geochemischen Systemzuständen zu Beginn der Radionuklidfreisetzung. Das polytherme Modell für das System Cs-(Na/K/Mg/Ca)-Cl/SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O wird überarbeitet und für das System SeO<sub>3</sub>-(Na/K/Mg/Ca)-Cl/SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O wird ein Modell erstellt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                 | Förderkennzeichen:   |
|--|-----------------|----------------------|
| Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Ba                                       | utzner Landstr. | 02 E 11607B          |
| 400, 01328 Dresden   |                 | 02 E 11007B          |
| Vorhabensbezeichnung:  |                 |                      |
| Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und                                     | Aktivierungspro | dukte im Nahfeld von |
| Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA |                 |                      |
| II), Teilprojekt B   |                 |                      |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle       |                 |                      |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |                 |                      |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitrai | um:                  |
| 01.09.2017 bis 30.06.2021  | 01.01.2021 bis  | 30.06.2021           |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:  |                      |
| 515.767,00 EUR   | Dr. Müller      |                      |

Primäres Ziel des Verbundprojektes VESPA mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, dem Karlsruhe Institut für Technologie und dem Forschungszentrum Jülich ist es, Konservativitäten in den Annahmen, die z. Z. für die Radionuklide <sup>14</sup>C, <sup>79</sup>Se, <sup>129</sup>I und <sup>99</sup>Tc in Langzeitsicherheitsnachweisen angenommen werden, abzubauen. Ziel des Teilvorhabens des HZDR ist die Identifikation von Rückhalteprozessen für das Spaltprodukt <sup>99</sup>Tc und im geringeren Umfang für <sup>79</sup>Se. Dabei werden auch konkurrierende Reaktionen erfasst sowie der Einfluss des Redoxzustandes untersucht. Neben Batchversuchen sind spektroskopische Speziesnachweise ein wichtiger Bestandteil der Untersuchungen. Thermodynamische Daten werden ermittelt und im Fall hinreichender Qualifizierung in die Referenzdatenbasis THEREDA implementiert. Sorptionsparameter werden in die mineralspezifische Sorptionsdatenbank RES<sup>3</sup>T eingebunden. Ein weiteres Ziel stellt die Untersuchung und Charakterisierung der relevanten niederen Oxidationsstufen des <sup>99</sup>Tc dar.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Sorptionsprozesse

- AP1.1: Sorption von Selen (0 und -II) an verschiedenen Eisen-Korrosionsphasen und Modelmineraloxiden
- AP1.2: Sorption und Einbau von Tc an verschiedenen Eisen-Korrosionsphasen
- AP1.3: Auswirkung der Variabilität von Eisen-Korrosionsphasen auf den Rückhalt von Selen und Technetium
- AP2: Tc-Chemie inklusive niedriger Oxidationsstufen
- AP3: Datentransfer zur Langzeitsicherheitsanalyse
- AP4: Erstellung Abschlussbericht

#### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1:

- Die Tc(VII) Reduktion zu Tc(IV) wurde untersucht an Sn(II) beschichtetem nanopartikulärem Alumina und in Sn(II) haltigen Lösungen bei verschiedenen pH-Werten (pH 4,5, 6,5 und 10,5). Die Tc-Entfernung aus der Lösung ist quantitativ (100 %), außer wenn Tc direkt mit Sn(II) in Lösung bei pH 10,5 vorliegt. Des Weiteren wurden Re-Oxidationsexperimente

für die oben beschriebenen Systeme durchgeführt. Über kurze Zeiträume (< 7 Tage) ist die Re-Oxidation zu Tc(VII) schneller in Anwesenheit der Sn(II) beschichteten Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Proben im Vergleich zu den wässrigen Sn(II) Proben. Über längere Zeiträume kehrt sich dies allerdings um.

- Erste Tc-Retentionsexperimente wurden auch mit vorsorbiertem S(-II) auf nanopartikulärem Alumina durchgeführt. Die Tc Entfernung aus der Lösung steigt mit sinkendem pH-Wert und erreicht maximal 45 %.
- Röntgenspektroskopische Untersuchungen (XANES + EXAFS) an ROBL/ESRF zur Untersuchung der Tc Wechselwirkungen mit Grünem Rost als auch mit Sn(II) und S(-II) beschichtetem nanopartikulärem Alumina wurden durchgeführt.

#### AP2:

- Erste elektrochemische Untersuchungen (Cyclovoltammetrie) zur Reduktion von Tc(VII) in sulfat-, nitrat- und carbonathaltigen Lösungen wurden durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen eine hohe Ähnlichkeit des Reduktionsverhaltens zwischen Sulfat und vorherigen Ergebnissen von Perchlorat. Dies bestätigt unsere Schlussfolgerungen, dass beide Systeme keine Komplexbildung in wässriger Lösung hervorrufen. Erste Ergebnisse der Untersuchungen mit Nitrat und Carbonat sind signifikant unterschiedlich und bedürfen weiterer Experimente.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP1:

- Detaillierte Analyse der erhaltenen röntgenspektroskopischen Daten
- Weitere Untersuchungen des Tc Rückhalts an S(-II) vorsorbiertem Aluminumoxid unter Berücksichtigung weiterer Parameter, z. B. pH, Ionenstärke, [S(-II)], [Tc]
- Identifikation von möglichen Sekundärphasen nach Reaktion von Tc mit Sn(II) und S(-II) beschichtetem nanopartikulärem Alumina mittels Röntgenbeugung, Röntgenphotoelektronenspektroskopie, Raman Mikroskopie, Elektronenmikroskopie

#### AP2:

- Aufbau einer spektro-elektrochemischen Zelle außerhalb der Handschuhbox
- Levich- und Randles-Sevcik-Analyse und spektro-elektrochemische Analyse der Tc(VII)-Reduktion in Anwesenheit weiterer Hintergrundelektrolyten, z. B. Sulfat, Nitrat oder kleine organische Moleküle

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Rodríguez Hernández, D. M.: Technetium environmental chemistry: Mechanisms for the surface-mediated reduction of Tc(VII); Doktorarbeit an der TU Dresden

Rodríguez, D.M.; Mayordomo, N.; Schild, D.; Shams Aldin Azzam, S.; Brendler, V.; Müller, K.; Stumpf, T.: Reductive immobilization of <sup>99</sup>Tc(VII) by FeS<sub>2</sub>: the effect of marcasite. *Chemosphere* **2021**, *281*, 130904

Mayordomo, N.; Rodríguez, D.M.; Rossberg, A.; Foerstendorf, H.; Heim, K.; Brendler, V.; Müller, K.: Analysis of technetium immobilization and its molecular retention mechanisms by Fe(II)-Al(III)-Cl layered double hydroxide. *Chem. Eng. J.* **2021**, *408*, 127265

| Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher I Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz genstein-Leopoldshafen  Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und MöII), Teilprojekt C  Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung | Aktivierungsproglichkeiten ihrei | r Rückhaltung (VESPA |
|--|----------------------------------|----------------------|
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |                                  |                      |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra                   | um:                  |
| 01.09.2017 bis 30.06.2022  | 01.01.2021 bis                   | 30.06.2021           |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:                   |                      |

Dr. Altmaier

# 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Primäres Ziel des Verbundvorhabens VESPA II ist, das Verständnis der Lösungseigenschaften und der Rückhaltung von mobilen Spalt- und Aktivierungsprodukten mit Fokus auf reduzierende Bedingungen entscheidend zu verbessern. Dabei sollen insbesondere zuverlässigere chemische Eingangsdaten für langzeitanalytische Modellrechnungen für generische Endlagerbedingungen unterschiedlicher Wirtsgesteinsformationen zur Verfügung gestellt werden. Dies umfasst unter anderem das Stoffinventar und den Quellterm für <sup>129</sup>Iod sowie Löslichkeitsgrenzen und Sorptionskoeffizienten für Selen-, Iod- und Technetiumspezies.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Arbeiten von KIT-INE im Rahmen von VESPA II gliedern sich in folgende Arbeitspakete:

- AP1: Chemische Thermodynamik von Technetium(IV).
- AP2: Rückhaltung von Radionukliden durch Sekundärphasen im Nahfeld: Rückhaltung von Selen(IV) durch Calcit.
- AP3: Rückhaltung von Radionukliden durch Sekundärphasen im Nahfeld: Rückhaltung von Iod durch Fe-Sekundärphasen.
- AP4: Freisetzung von <sup>129</sup>I aus der Abfallmatrix.
- AP5: Einbindung von Daten und Erkenntnissen in langzeitsicherheitsanalytische Modellrechnungen (erfolgt gemeinsam im Projektverbund).
- AP6: Dokumentation.

504.649,00 EUR

# 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden von KIT-INE in VESPA II die folgenden Arbeiten durchgeführt:

AP1: (i) Veröffentlichung des Manuskripts (inklusive der EXAFS Daten) zu den Arbeiten im Tc(IV)-SO<sub>4</sub> System. (ii) Veröffentlichung des Manuskripts zu den Arbeiten im Tc-Gluconat System. (iii) Veröffentlichung des Manuskripts zu den Arbeiten mit Re für Analogiebetrachtungen zu den Tc-Systemen. (iv) Abschluss der Löslichkeitsexperimente mit Tc bei Anwesenheit von Sulfid. (v) Beginn des Schreibens der Dissertation (S. Duckworth).

- AP2: Beendigung der Langzeit-Rekristallisationsexperimente.
- AP3: (i) Abschluss aller Sorptionsversuche zur Wechselwirkung zwischen Iodid und Grüner-Rost Festphasen. (ii) Fortsetzung und Abschluss des Schreibens der Dissertation (T. Platte).
- AP4: (i) Abschließende Gas- und Lösungsprobennahme des Auslaugexperimentes zum Freisetzungsverhalten von <sup>129</sup>I (IRF) nach 1162 Tagen und anschließende Beendigung des Experiments. (ii) Weitere alkalische Aufschlüsse von Kernbrennstoff in der abgeschirmten Boxenlinie des INE und Anwendung der entwickelten Separationsmethode für <sup>129</sup>I auf Aufschlusslösungen zur Ermittlung des <sup>129</sup>I Inventars und Vergleich mit Rechnungen.

AP5 und AP6: Es wurden keine Arbeiten im Berichtszeitraum durchgeführt.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: (i) Abschluss des Schreibens und Verteidigung der Dissertation (S. Duckworth). Für die Arbeiten in der Verlängerungsphase zudem: (ii) Literaturrecherche und thermodynamische Rechnungen zu den Systemen Tc-EDTA, NTA, ISA, Zitrat, Oxalat und Phthalat. (iii) Orientierende Löslichkeitsexperimente (Unter- und Übersättigung) in den Systemen Tc-EDTA, NTA, ISA, Zitrat, Oxalat und Phthalat. (iii) Experimentelles Design für umfassende Löslichkeitsexperimente mit Tc bei Anwesenheit von Sulfid.
- AP2: Diskussion der Ergebnisse. Beginn der Erstellung des Abschlussberichts zu diesem AP.
- AP3: (i) Abschluss des Schreibens und Verteidigung der Dissertation (T. Platte). Beginn der neuen experimentellen Arbeiten in der Verlängerungsphase zur Tc-Rückhaltung an Fe-Phasen.
- AP4: (i) Abschuss der Datenauswertung. (ii) Es sind keine weiteren experimentellen Arbeiten im kommenden Berichtszeitraum geplant. (iii) Zusammenfassende Darstellung der Ergebnisse. Beginn der Erstellung des Abschlussberichts zu diesem AP.
- AP5 und AP6: Es sind keine Arbeiten im kommenden Berichtszeitraum geplant. Ggf. Start der Berichtserstellung.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Dardenne, Duckworth et al. "A Combined Study of Tc Redox Speciation in Complex Aqueous Systems: Wet-Chemistry, Tc K-/L3-Edge X-ray Absorption Fine Structure, and Ab Initio Calculations", Inorganic Chemistry, 2021, https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.1c01487 Duckworth et al. "Impact of sulfate on the solubility of Tc(IV) in acidic to hyperalkaline aqueous reducing systems" Radiochimica Acta, 2021, https://doi.org/10.1515/ract-2021-1044 Duckworth et al. "Redox chemistry, solubility and hydrolysis of Re in reducing aquatic systems. Thermodynamic description and comparison with Tc", Applied Geochemistry, 2021, https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2021.105037

Platte et al. "Retention of Iodide and Chloride by Formation of a Green Rust Solid Solution GR-Cl1-xIx: A Multiscale Approach", Inorganic Chemistry, 2021, https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.1c01243

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen:   |  |
|--|---------------------------|----------------------|--|
| Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johner  | n-Straße,                 | 02 E 11607D          |  |
| 52428 Jülich   |                           | 02 E 11007D          |  |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                      |  |
| Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und                                     | Aktivierungspro           | dukte im Nahfeld von |  |
| Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA |                           |                      |  |
| II), Teilprojekt D   |                           |                      |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle       |                           |                      |  |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |                           |                      |  |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                  |  |
| 01.09.2017 bis 30.06.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                      |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                      |  |
| 471.605,00 EUR   | Dr. Deissmann             |                      |  |

VESPA II baut auf den Erkenntnissen aus dem Vorläuferprojekt VESPA auf, indem offene Fragen zur Rückhaltung von Radionukliden, der chemischen Thermodynamik von Spalt- und Aktivierungsprodukten, und der Einbindung von Daten und Erkenntnissen in die Langzeitsicherheitsanalyse bearbeitet werden. Dabei sollen insbesondere zuverlässigere chemische Eingangsdaten für langzeitanalytische Modellrechnungen für generische Endlagerbedingungen unterschiedlicher Wirtsgesteinsformationen zur Verfügung gestellt werden. Dies umfasst das Stoffinventar und den Quellterm für <sup>129</sup>Iod sowie Löslichkeitsgrenzen und Sorptionskoeffizienten für Selen-, Iod- und Technetiumspezies.

Innerhalb des Beitrags des IEK-6 zu VESPA II wird die Retention von Iodid an lamellaren Doppelhydroxid-Verbindungen (LDHs) im Detail untersucht. Das langlebige Isotop <sup>129</sup>I spielt in vielen Analysen zur Langzeitsicherheit von tiefen geologischen Endlagern für hochradioaktive Abfälle eine große Rolle. Im Rahmen des vorgeschlagenen Projekts sollen unterschiedliche Rückhaltemechanismen von Iodid an LDH quantitativ bewertet werden und Daten für Modellrechnungen ermittelt werden. Zusätzlich werden Daten zum Stoffinventar von <sup>129</sup>Iod in abgebrannten Brennelementen und damit der maximal aus dem Abfall freisetzbaren <sup>129</sup>I-Stoffmenge ermittelt.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm gliedert sich in 6 Arbeitspakete (AP), die nachfolgend kurz zusammengefasst sind:

AP1: 129 Iod-Inventar in bestrahltem Kernbrennstoff: Dieses AP beinhaltet eine Auswertung von Literaturdaten, die dann zur Abschätzung der 129 I-Inventare auch generische Abbrandrechnungen für repräsentative Brennelemente aus Leichtwasserreaktoren (DWR/SWR) und deren Bestrahlungshistorie verwendet werden.

AP2-AP4: sind experimentelle APs, in denen unterschiedliche Rückhaltemechanismen (Anionenaustausch, Einbau durch Ko-präzipitation und Rückhaltung in kalzinierten LDH-Phasen) von Iodid an LDH untersucht werden sollen. Neben strukturellen Untersuchungen steht die Quantifizierung von thermodynamischen Eigenschaften der untersuchten Phasen im Vordergrund.

- AP5: In diesem AP werden die Daten aus den experimentellen APs so aufbereitet, dass sie für Modellrechnungen an die Projektpartner übergeben werden können und letztlich auch der breiten Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt werden.
- AP6: Ergebnisdokumentation.

- AP2: Im Berichtszeitraum wurden die Experimente zur Bestimmung der Löslichkeit und weiterer thermodynamischer Daten der durch Anionenaustausch hergestellten (Mg,Ni)Al-LDH-I Phasen sowie die zugehörige Analytik abgeschlossen. Mit der Auswertung der Daten unter Verwendung eines hierzu erarbeiteten thermodynamischen Modells wurde begonnen. Des Weiteren wurden die Auswertung der an ausgewählte Phasen und Referenzmaterialien unter Verwendung eines neu angeschafften IR-Spektrometers durchgeführten IR-Messungen gestartet.
- AP3: Im Rahmen des AP3 wurden abschließende XRD- und IR-Untersuchungen zur Kristallinität der durch Kopräzipitation hergestellten und vermutlich metastabilen (Mg,Ni)Al-LDH-I Phasen durchgeführt, um Abhängigkeiten der Materialeigenschaften von Prozessparametern (u. a. Ionenstärke, Temperatur, Ausgangskonzentrationen der Metallkationen etc.) abzuleiten.
- AP5: Mit der Aufbereitung der experimentellen Daten aus den AP2 4 wurde begonnen und entsprechende Verteilungskoeffizienten (*K*<sub>d</sub>-Werte) zur Beschreibung der Retention von Iodid durch (Mg,Ni)Al-LDH infolge der verschiedenen Rückhaltemechanismen ermittelt; nach abschließender Qualitätssicherung werden die Daten den Projektpartnern zur Durchführung von Modellrechnungen zur Verfügung gestellt.
- AP6: Mit der (abschließenden) Dokumentation der experimentellen Arbeiten zur Rückhaltung von Iodid durch LDH-Phasen wurde begonnen.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Halbjahr sollen die Auswertung der thermodynamischen Daten für die durch Anionenaustausch hergestellten (Mg,Ni)Al-LDH-I Phasen, die Restarbeiten zu den durch Kopräzipitation hergestellten LDH-Phasen sowie die Aufbereitung der experimentellen Daten abgeschlossen werden. Zudem ist vorgesehen, die Ergebnisdokumentation bezüglich der Arbeiten zur Iodidretention durch (Mg,Ni)Al-LDH Phasen weitestgehend abzuschließen. Des Weiteren soll mit den Arbeiten zur vorgesehenen "Proof of Concept" Studie zur Untersuchung des Einbaus von Ra-226 in verschiedene (polymorphe) Karbonatminerale (Calcit, Aragonit, Vaterit) begonnen werden. Die diesbezüglich geplanten Arbeiten umfassen i) Methodenentwicklung zur Untersuchung der diffusionsinduzierten Fällung von Ca(Sr)CO<sub>3</sub>-Mischphasen und des Ra-226-Einbaus mittels Mikrofluidik (u. a. Auswahl und Test geeigneter Materialien für die Reaktoren, Entwicklung des Reaktordesigns und der Methodik zur *In-situ*-Präzipitation von Karbonatmischkristallen unter kontrollierten Umgebungsbedingungen) sowie ii) Durchführung orientierender DFT-Berechnungen zur Stabilität des Ra-226-Einbaus in Karbonate und zu den thermodynamischen Eigenschaften der Mischkristallphasen (u. a. Wechselwirkungsparameter).

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:  |                           | Förderkennzeichen: |
|---|---------------------------|--------------------|
| BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine                                       |                           | 02 E 11617A        |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                    |
| Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager |                           |                    |
| für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland        |                           |                    |
| (CHRISTA II), Teilprojekt A   |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle        |                           |                    |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.1                              |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.09.2017 bis 30.11.2021   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                    |
| 865.583,78 EUR  | Jobmann                   |                    |

Im Rahmen des Vorhabens wird ein Sicherheits- und Nachweiskonzept für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle in Kristallingestein in Deutschland entwickelt. Ein erstes Teilziel ist es, dafür plausible standortunabhängige generische geologische Modelle für unterschiedliche ewG-Typen zu entwickeln. Die darauf basierende weitere Konzeptentwicklung erfordert Kenntnisse sowohl über das Gesteinsverhalten als auch über physikalisch-chemische Prozesse, die innerhalb und außerhalb eines geplanten Endlagers während der zukünftigen Entwicklung ablaufen werden. Ein zweites Teilziel ist daher, einen generischen FEP-Katalog für Endlager in Kristallingesteinen zu entwickeln, auf dessen Basis später eine Szenarienentwicklung durchgeführt werden kann. Kernelemente eines Nachweiskonzeptes sind die Nachweise zur Barrierenintegrität und die radiologische Analyse. Die Teilziele in dem Zusammenhang sind die Konzeption und beispielhafte Durchführung von Integritätsanalysen sowohl für die geologische als auch die geotechnischen Barrieren sowie die Berechnung radiologischer Sicherheitsindikatoren für die zu betrachtenden ewG-Typen. Zum Nachweis der Integrität werden die in den Sicherheitsanforderungen qualitativ definierten Integritätskriterien soweit quantifiziert, dass ein rechnerischer Nachweis anhand konkreter Zahlenwerte erfolgen kann.

- AP1: Sicherheits- und Nachweiskonzept im Kristallingestein
- AP2: Geologie deutscher Kristallinkomplexe, Modelle und Datenbasis
- AP3: Erstellung eines generischen FEP-Kataloges für Endlager im Kristallin
- AP4: Konzeption und beispielhafte Durchführung von Integritätsanalysen
- AP5: Berechnung radiologischer Sicherheitsindikatoren
- AP6: Dokumentation

Im Rahmen des Arbeitspaketes 1 wurde die bisherige Beschreibung der Sicherheitsstrategie, die sich noch an den Sicherheitsanforderungen des BMU von 2010 orientiert hat, gemäß den Anforderungen, die sich aus der Sicherheitsanforderungsverordnung des BMU von 2020 ergeben, komplett überarbeitet. Ebenfalls in Bezug zur neuen Anforderungsverordnung wurde eine strukturelle Vorgehensweise zur Bewertung der Langzeitsicherheit des Endlagers unter Berücksichtigung aller drei Einlagerungsoptionen erarbeitet. Die strukturelle Vorgehensweise wurde in zwei verschiedenen Ablaufdiagrammen grafisch dargestellt. Ein Diagramm für das "modifizierte KBS3 Konzept" und ein Diagramm für die beiden Einlagerungsoptionen mit einem oder mehreren ewG. Der jeweilige Ablauf der Systemanalyse und die zugehörige Bewertung der Langzeitsicherheit wurden detailliert beschrieben und in einem Bericht, zunächst als Entwurf, dokumentiert. Die Systemanalyse folgt der Anforderungsverordnung, indem die entsprechenden Paragraphen zur Integritätsanalyse der geologischen, der technischen und geotechnischen Barrieren sowie die Paragraphen mit den Grenzwerten für den Massenaustrag und den Dosiswerten als eigenständige Module im strukturellen Ablauf abgebildet sind. Anhand dieser Ablaufdiagramme lässt sich die Vorgehensweise bei der Sicherheitsbewertung transparent vermitteln.

Im Rahmen des Arbeitspaketes 3 werden drei generische FEP-Kataloge für Endlager im Kristallin erarbeitet, die sich auf die drei unterschiedlichen Optionen "multipler ewG", "überlagernder ewG" und "modifiziertes KBS3-Konzept" beziehen. Im Berichtszeitraum wurden für die Option "modifiziertes KBS-3 Konzept" die Abhängigkeiten der einzelnen FEP eines Systems untereinander erarbeitet. Parallel dazu wurde auf Basis der Vorlage aus dem früheren AN-SICHT-Vorhaben eine FEP-Datenbank erstellt und an die aktuellen Bedürfnisse angepasst. Mit der Eintragung der FEP in die Datenbank wurde begonnen.

Am 15.06.2021 fand eine Informationsveranstaltung zu der Bearbeitung und den Ergebnissen dieses Vorhabens statt. Die Veranstaltung wurde online durchgeführt und fand unter Beteiligung des BMWi, des BMU, des BASE und weiteren Fachorganisationen statt. Es konnte u. a. festgehalten werden, dass das Vorhaben CHRISTA-II bereits eine Reihe von grundlegenden Informationen liefern kann, wenn es darum geht, ein Sicherheitskonzept für ein Endlager in einer Kristallinformation in Deutschland zu erarbeiten.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- Review und ggf. Überarbeitung der vollständigen Beschreibung der Systemanalyse und Sicherheitsbewertung für alle drei Einlagerungsoptionen und Finalisierung des Berichtes zur Sicherheitsstrategie und Systemanalyse.
- Erstellung des Berichtes zur Analyse des technischen und geotechnischen Barrierensystems.
- Vorbereitung und Erstellung des Abschlussberichtes bzw. des Syntheseberichtes.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:   |                | Förderkennzeichen: |
|--|----------------|--------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   |                | 02 E 11617B        |
| Vorhabensbezeichnung:  |                |                    |
| Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt B |                |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle   |                |                    |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.1   |                |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra | um:                |
| 01.10.2017 bis 30.11.2021  | 01.01.2021 bis | 30.06.2021         |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter: |                    |
| 870.640,00 EUR   | Dr. Wolf       |                    |

Im Rahmen des Vorhabens wird ein Sicherheits- und Nachweiskonzept für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle in Kristallingestein in Deutschland entwickelt. Ein erstes Teilziel ist es, dafür plausible standortunabhängige generische geologische Modelle für unterschiedliche ewG-Typen zu entwickeln. Die darauf basierende weitere Konzeptentwicklung erfordert Kenntnisse sowohl über das Gesteinsverhalten als auch über physikalisch-chemische Prozesse, die innerhalb und außerhalb eines geplanten Endlagers während der zukünftigen Entwicklung ablaufen werden. Ein zweites Teilziel ist daher, einen generischen FEP-Katalog für Endlager in Kristallingesteinen zu entwickeln, auf dessen Basis später eine Szenarienentwicklung durchgeführt werden kann. Kernelemente eines Nachweiskonzeptes sind die Nachweise zur Barrierenintegrität und die radiologische Analyse. Die Teilziele in dem Zusammenhang sind die Konzeption und beispielhafte Durchführung von Integritätsanalysen sowohl für die geologische als auch die geotechnischen Barrieren sowie die Berechnung radiologischer Sicherheitsindikatoren für die zu betrachtenden ewG-Typen. Zum Nachweis der Integrität werden die in den Sicherheitsanforderungen qualitativ definierten Integritätskriterien soweit quantifiziert, dass ein rechnerischer Nachweis anhand konkreter Zahlenwerte erfolgen kann.

- AP1: Sicherheits- und Nachweiskonzept im Kristallingestein
- AP2: Geologie deutscher Kristallinkomplexe, Modelle und Datenbasis
- AP3: Erstellung eines generischen FEP-Kataloges für Endlager im Kristallin
- AP4: Konzeption und beispielhafte Durchführung von Integritätsanalysen
- AP5: Berechnung radiologischer Sicherheitsindikatoren
- AP6: Dokumentation

- AP3: Erarbeitung der Abhängigkeitskonfiguration der FEP für das modifizierte KBS3-Konzept. Gemeinsame Besprechung der FEP-Abhängigkeiten mit BGR und BGETEC.
- AP4: In AP4 wurden im ersten Halbjahr keine Arbeiten durchgeführt.
- AP5: Fertigstellung der Strömungs- und Transportrechnungen für das von der BGR entwickelte geologische Modell für die ewG-Konfiguration Typ "überlagernder ewG" mit dem Grundwasserströmungs- und Transportmodellen FEFLOW und d<sup>3</sup>f<sup>++</sup> und Auswertung der Ergebnisse.
  - Auswertung der in CHRISTA-II untersuchten Endlagerkonzepte hinsichtlich der in §4 der EndlSiAnfV definierten Kriterien zum sicheren Einschluss, Vergleich mit der effektiven Dosis und weiteren Sicherheitsindikatoren.
- AP6: Beginn mit der Dokumentation der Ergebnisse aus dem Vorhaben CHRISTA-II. Vorbereitung und Durchführung der Online-Infoveranstaltung "Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland" am 15.06.2021 mit 50 Teilnehmern. Vorstellung der Ergebnisse aus AP5 und Diskussion zum zukünftigen FuE-Bedarf für Endlagersysteme im Kristallingestein.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Dokumentation der Abhängigkeitskonfiguration der FEP im FEP-Katalog für das modifizierte KBS3-Konzept.
- AP4: Ableitung von Maßstäben zur Bewertung, wann eine erhebliche Beeinträchtigung der Barrierewirkung durch Änderung chemischer Verhältnisse zu erwarten ist. Erarbeitung eines entsprechenden Nachweiskonzeptes.
- AP6: Dokumentation der Ergebnisse aus dem Vorhaben CHRISTA-II.

Die Arbeiten zu den AP1, 2, und 5 sind abgeschlossen.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:   |                                    | Förderkennzeichen:       |
|--|------------------------------------|--------------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   | GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln |                          |
| Vorhabensbezeichnung:  |                                    |                          |
| Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für                               | die Endlagerung                    | hochradioaktiver Abfälle |
| in Tonformationen (AVET)   |                                    |                          |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                                    |                          |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                       |                                    |                          |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra                     | um:                      |
| 01.11.2017 bis 31.10.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021          |                          |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:                     |                          |
| 1.813.589,00 EUR   | Dr. Zhang                          |                          |

Das Vorhaben zur Untersuchung der Eignung arteigener Versatz-/Verschlussmaterialien für HAW-Endlager im Tongestein hat das Ziel, geotechnische Eigenschaften von Ausbruchsmaterial aus dem Opalinuston (ist dem in einem deutschen Endlager zu erwartenden Wirtsgestein am ähnlichsten - Standortmodell SÜD) und des Gemisches mit Bentonitzusatz experimentell zu bestimmen und die Eignung als Versatz- und Verschlussmaterialien zu analysieren. Dadurch soll ein verbessertes Verständnis für das Materialverhalten erreicht und eine Grundlage für eine belastbare Prognose der Langzeitprozesse im Versatz- und Verschlusssystem mit Blick auf die langfristige Abdichtung eines Endlagers in einer Tonsteinformation geschaffen werden. Damit leistet das Projekt einen Beitrag zur Absicherung der Grundlagen für die Langzeitsicherheitsanalyse von HAW-Endlagern in Deutschland.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Laboruntersuchungen werden am Ausbruchmaterial aus der Auffahrung einer neuen Strecke in der sandigen Fazies des Opalinustons im Untertagelabor Mont-Terri und am Gemisch mit Bentonitzusatz in drei Arbeitspaketen durchgeführt:

- AP1: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften wie z. B. Kompaktion und Permeabilität des Ausbruchmaterials zur langfristigen Abdichtung der Endlagerhohlräume
- AP2: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften des kompaktierten Gemisches aus dem Ausbruchtonstein mit Bentonitzusatz zur Prüfung der Eignung für den Verschluss der Strecken und Schächte
- AP3: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften des Gemisches aus dem Ausbruchtonstein mit Bentonitzusatz zur Prüfung der Eignung als HAW-Buffermaterial bei hohen Temperaturen in Form von hochverdichteten Formsteinen für Auflager von Abfallbehältern und in Form von Granulat zur Verfüllung des Resthohlraums
- AP4: Untersuchung des Gastransportes in geschädigtem Tonstein zur Beteiligung am EU-Projekt EURAD im WP6-GAS

Die Versuche zur Wasseraufnahmefähigkeiten vom Bentonit, Ausbruchtonstein und Tonstein-Bentonit Gemisch (7/3) sind abgeschlossen. Aufgrund des hohen Gehalts an Montmorillonit zeigt der Bentonit eine höchste Wasseraufnahmefähigkeit. Im Gegensatz dazu sind die Wasseraufnahmekapazitäten des Tonsteins und Tonstein-Bentonit-Gemisches begrenzt.

Die Messungen von Quellverformung, Kompaktion, Wasserpermeabilität und Gasdurchbruchdruck von vier Proben sind abgeschlossen. Die Proben sind (1) kompaktierte Ausbruchtonstein-Blöcken; (2) Tonstein-Bentonit-Blöcken (7/3); (3) Bentonit-Pellets/Pulver-Gemisch (8/2) und (4) Tonstein-Bentonit-Gemisch (7/3). Es ist festgestellt:

- die Quellfähigkeit ist von Bentonit-Gehalt und Probendichte bestimmt;
- die Porosität und Wasserpermeabilität nehmen mit steigender Belastung ab;
- Gasfluss in der wasser-gesättigten und kompaktierten Tonmaterialien benötigt hohe Gasdrücke, um die kapillaren Schwellen zu überwinden. Der Gasdurchbruchdruck des reinen Bentonits ist hohe bis zum mechanischen Begrenzungsdruck, und ist viel höher als die Gasdurchbruchdrücke des kompaktierten Ausbruchtonsteins und Tonstein-Bentonit-Gemisches.

Eine neue Versuchsreihe folgt mit vier neuen Proben des Bentonits und Tonstein-Bentonit-Gemisches zur Untersuchung von Temperatureinflüssen auf die Quellung, Kompaktion, Wasserpermeabilität und Gastransport.

GRS beteiligt am EU-Projekt EURAD mit Laboruntersuchungen zur Ermittlung des Gasflussverhaltens von geschädigtem Tonstein. Eine Versuchsreihe wurde mit drei geschädigten Proben aus Opalinuston und Callovo-Oxfordian-Tonstein gestartet. Selbstdichtende Verhalten der geschädigten Tonproben wurden durch Messung der Kompaktion und Wasserpermeabilitätsänderung unter erhöhten Belastungen ermittelt. Danach wird Gas in die wasser-gesättigten Proben injiziert, um Gasdurchbruchdrücke und Gaspermeabilität zu bestimmen. Auswirkung der Gasströmung auf die Barrierefunktion der Auflockerungszone wird durch Bestimmung von Änderungen der Wasserpermeabilität vor und nach der Gasströmung beurteilt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Versuche zu Temperatureinflüsse auf die Eigenschaften des Bentonits und Tonstein-Bentonit-Gemischs
- Weiterführung der Gasströmungsteste mit den geschädigten Tonsteinproben

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:  |                           | Förderkennzeichen:         |
|---|---------------------------|----------------------------|
| Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz                                    | 5,                        | 02 E 11637A                |
| 64289 Darmstadt   |                           | 02 E 1103/A                |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                            |
| Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Mod  | lellierungen zur (        | Charakterisierung des tek- |
| tonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland |                           |                            |
| (SpannEnD), Teilprojekt A: 3D-Spannungsmodell und Aufskalierung                     |                           |                            |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle      |                           |                            |
| Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2  |                           |                            |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra            | um:                        |
| 01.01.2018 bis 31.12.2021   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                            |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                            |
| 241.009,00 EUR  | Prof. Dr. Henk            |                            |

Das tektonische Spannungsfeld in der Erdkruste wirkt sich auf eine Vielzahl der Kriterien zur Standortauswahl für die Entsorgung radioaktiver Abfälle aus. Eine verlässliche Prognose im Vorfeld von Erkundungsmaßnahmen wird allerdings dadurch erschwert, dass das Spannungsfeld in seiner Orientierung und Magnitude nicht einheitlich ist. Vielmehr können in Abhängigkeit vom Untergrundaufbau (Lithologien, Störungen) lokal deutliche Abweichungen von der überregional bekannten Spannungsverteilung auftreten. Um ein prozessbasiertes Verständnis dieser räumlichen Variabilität zu erreichen, wird ein geomechanisch-numerisches 3D-Spannungsmodell für Deutschland (Dimensionen ca. 1200 x 900 x 80 km³) erstellt. Dieses Modell wird an punktuell gemessenen Spannungsdaten kalibriert und ermöglicht auf Basis kontinuumsmechanischer Ansätze Prognosen für Bereiche ohne Spannungsdaten und die Ableitung aller sechs Komponenten des Spannungstensors. Darüber hinaus werden Modellierungswerkzeuge für räumliche Skalen übergreifende Modelle entwickelt. So wird ein konsistenter Spannungsübertrag zwischen dem Deutschland-Modell und ca. drei Größenordnungen kleineren Teilmodellen ermöglicht. Alle Arbeiten liefern die erforderlichen Grundlagen und Modellierungswerkzeuge für zukünftige geomechanische Standortmodelle.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Verbundprojekt gliedert sich in zwei Arbeitspakete (APs):

In AP1 (Teilprojekt A) wird ein großräumiges geomechanisch-numerisches 3D-Spannungsmodell für Deutschland entwickelt, das an allen aktuell verfügbaren Spannungsdaten kalibriert wird.

In AP2 (Teilprojekt B) werden Modellierungstechniken zur Wahl geeigneter, skalenabhängiger Gesteins- bzw. Gebirgsparameter sowie Konzepte für die für ein entsprechendes Modellvolumen erforderlichen repräsentativen Kalibrierungsdaten untersucht.

Weitere Arbeitsziele sind die Weiterentwicklung der Modellierungswerkzeuge, welche die Grundlagen für eine zukünftige Standortcharakterisierung liefern und einen zukünftigen Standortvergleich bezüglich des Spannungsfeldes nach einheitlichen Kriterien ermöglicht und die Erstellung einer Datenbank zu Spannungsmagnituden.

Im ersten Halbjahr 2021 lag der Fokus der Arbeiten auf der Kalibrierung und Optimierung des im Bereich der Sedimentbecken höher aufgelösten Spannungsmodells für Deutschland. Dieses Modell umfasst insgesamt 21 Einheiten. Den Schichten wurden individuelle, z. T. auch lateral variierende Materialeigenschaften zugeordnet (Poissonzahl, E-Modul und Dichte). Die laterale Auflösung liegt bei etwa 3,75 x 3,75 km<sup>2</sup>, die vertikale Auflösung innerhalb der obersten 10 km bei etwa 375 m. Die Gesamtzahl der Elemente dieses geomechanisch-numerischen Modells beträgt 3,58 Millionen. Die Modellergebnisse liefern den vollständigen Spannungstensor im Modellraum. Daraus lassen sich u.a. räumliche Variationen in den Differentialspannungen (auch relativ zu einem Versagenskriterium) sowie im tektonischen Regime ableiten. Die Ergebnisse des höher aufgelösten Modells zeigen im Gegensatz zu den bisherigen Simulationen eine deutlich bessere Übereinstimmung der modellierten mit den gemessenen S<sub>Hmax</sub> Magnituden. Der Fit für die Shmin Magnituden und die Orientierung von SHmax ist unverändert gut. Ein entscheidender Faktor für die bessere Übereinstimmung mit den S<sub>Hmax</sub> Daten ist die feinere stratigraphische Auflösung und ein E-Modul Gradient, der innerhalb der obersten 1,5 km implementiert wurde. Dieser E-Modul-Gradient repräsentiert Schwerkrafteffekte und die natürliche Auflockerung des Gebirges und kann damit die S<sub>Hmax</sub> Magnituden in den oberflächennahen Bereichen des Modells deutlich bessere repräsentieren. Diese Modellierungsergebnisse des höher aufgelösten Spannungsmodells für Deutschland liefern auch die Grundlage für die vom Verbundpartner KIT durchgeführte "slip tendency"-Analyse der Störungen.

Darüber hinaus wurde das Manuskript zu dem ersten, noch geringer aufgelösten Modell (Ahlers et al., 2020) nach dem Review überarbeitet und erneut bei dem Journal Solid Earth eingereicht. Mittlerweile ist die Arbeit angenommen worden. Im Zuge dessen wurden auch die dazugehörigen vollständigen Modellergebnisse als Datensatz veröffentlicht (Ahlers et al., 2021). Begleitend zum Projekt wurde der Einfluss von Materialparametern und Diskontinuitäten auf die Orientierung des Spannungsfeldes untersucht. (Reiter, 2021).

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr sollen die letzten Auswertungen des aktuellen Modells abgeschlossen und ggf. noch kleinere Anpassungen vorgenommen werden. Abschließend sollen die Ergebnisse aufbereitet und in einem weiteren Manuskript zur Veröffentlichung vorbereitet werden. Wie die Ergebnisse des vorherigen Modells, sollen dann auch die vollständigen Ergebnisse über eine Datenpublikation öffentlich zugänglich gemacht werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

#### **Publikation**

Ahlers, S., Henk, A., Hergert, T., Reiter, K., Müller, B., Röckel, L., Heidbach, O., Morawietz, S., Scheck-Wenderoth, M., Anikiev, D.: Crustal stress state of Germany - Results of a 3D geomechanical model, https://doi.org/10.48328/tudatalib-437, 2021

Reiter, K.: Stress rotation – impact and interaction of rock stiffness and faults, Solid Earth, 12, 1287–1307, https://doi.org/10.5194/se-12-1287-2021, 2021
Preprint/im Review

| Zuwendungsempfänger:  |                           | Förderkennzeichen:         |
|---|---------------------------|----------------------------|
| Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum                            |                           | 02 E 11637B                |
| GFZ, Telegrafenberg, 14473 Potsdam  |                           | 02 E 11037B                |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                            |
| Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Mod  | ellierungen zur (         | Charakterisierung des tek- |
| tonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland |                           |                            |
| (SpannEnD), Teilprojekt B: Multiskalenansatz  |                           |                            |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle      |                           |                            |
| Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2  |                           |                            |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra            | um:                        |
| 01.01.2018 bis 31.12.2021   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                            |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                            |
| 228.586,00 EUR  | Dr. Heidbach              |                            |

Das tektonische Spannungsfeld in der Erdkruste wirkt sich auf eine Vielzahl der Kriterien zur Standortauswahl für die Entsorgung radioaktiver Abfälle aus. Eine verlässliche Prognose im Vorfeld von Erkundungsmaßnahmen wird allerdings dadurch erschwert, dass das Spannungsfeld in seiner Orientierung und Magnitude nicht einheitlich ist. Vielmehr können in Abhängigkeit vom Untergrundaufbau (Lithologien, Störungen) lokal deutliche Abweichungen von der überregional bekannten Spannungsverteilung auftreten. Um ein prozessbasiertes Verständnis dieser räumlichen Variabilität zu erreichen, wird ein geomechanisch-numerisches 3D-Spannungsmodell für Deutschland (Dimensionen ca. 1200 x 900 x 80 km³) erstellt. Dieses Modell wird an punktuell gemessenen Spannungsdaten kalibriert und ermöglicht auf Basis kontinuumsmechanischer Ansätze Prognosen für Bereiche ohne Spannungsdaten und die Ableitung aller sechs Komponenten des Spannungstensors. Darüber hinaus werden Modellierungswerkzeuge für räumliche Skalen übergreifende Modelle entwickelt. So wird ein konsistenter Spannungsübertrag zwischen dem Deutschland-Modell und ca. drei Größenordnungen kleineren Teilmodellen ermöglicht. Alle Arbeiten liefern die erforderlichen Grundlagen und Modellierungswerkzeuge für zukünftige geomechanische Standortmodelle.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Verbundprojekt gliedert sich in zwei Arbeitspakete (APs):

In AP1 (Teilprojekt A) wird ein großräumiges geomechanisch-numerischen 3D-Spannungsmodells für Deutschland entwickelt, das an allen aktuell verfügbaren, tatsächlich gemessenen Spannungswerten kalibriert wird.

In AP2 (Teilprojekt B) werden Modellierungstechniken zur Wahl geeigneter, skalenabhängiger Gesteins- bzw. Gebirgsparameter sowie Konzepte für die für ein entsprechendes Modellvolumen erforderlichen repräsentativen Kalibrierungsdaten untersucht.

Weitere Arbeitsziele sind die Weiterentwicklung der Modellierungswerkzeuge, welche die Grundlagen für eine zukünftige Standortcharakterisierung liefern und einen zukünftigen Standortvergleich bezüglich des Spannungsfeldes nach einheitlichen Kriterien ermöglicht und die Erstellung einer Datenbank zu Spannungsmagnituden.

Auf der Grundlage des neuen Geologiedatengesetzes besteht nun die Möglichkeit, weitere Spannungsmagnitudendaten zu kompilieren. Es konnten bereits eine große Anzahl von neuen, zum Teil qualitativ hochwertigen Datensätzen aus Hydro-Frac Tests gesichtet werden. Die finale Freigabe der Daten gestaltet sich jedoch schwierig, da der Zugang zu den Daten und den Berichten über die Kontraktoren (z. B. MesyExperts aus Bochum) ermöglicht wurde und die Besitzer der Daten in vielen Fällen nicht offensichtlich sind. Es wird davon ausgegangen, dass dies im Laufe des Jahres geklärt werden kann. Eine anonymisierte Nutzung wäre bereits möglich, aber es wurde entschieden nur Daten zu nutzen, die frei zugänglich sind, so dass diese auch in anderen Kontexten genutzt werden können. Die Überführung der Spannungsmagnituden-Datenbank in die neu programmierte Datenbankstruktur des World Stress Map (WSM) Projektes basierend auf PostgreSQL konnte noch nicht wie vorgesehen abgeschlossen werden. Eine Beta-Version liegt jedoch vor und wird intensiv getestet.

Weiterhin wurden die Analysen der umfangreichen Parameterstudien, des generischen geomechanisch-numerischen 3D Modells, dass mit dem der Multi-Skalenansatz quantitativ getestet wird, abgeschlossen. Mit diesem Ansatz wurde gezeigt, wie aus einem großräumigen Modell das initiale Spannungsfeld für kleinräumige regionale bzw. lokale Modelle formal korrekt abgeleitet werden können. Insbesondere wurde getestet, unter welchen Bedingungen synthetische Spannungsmagnitudendaten aus großräumigen Modellen für die Kalibrierung von kleinräumigen Modellen verwendet werden können. Die Ergebnisse zeigen, dass der Ansatz der Verwendung synthetischer Spannungsmagnitudendaten robust ist im Gegensatz zum Übertrag von Verschiebungsrandbedingungen, die unter Umständen zu großen Abweichungen führen. Allerdings gibt es hierzu die einschränkende Voraussetzung, dass es mindestens einen sogenannten Leithorizont oder mehrere Leithorizonte im regionalen und lokalen Modell vorliegen muss, mit gleichen Werten für die Steifigkeit und Dichte in diesen Horizonten.

Bei der automatisierten Kalibrierung des generischen Modells unter Verwendung des Tools FAST Calibration v1.0 (Ziegler, 2018) stellten wir fest, dass eine Überarbeitung und Erweiterung des Tools für das Projekt hilfreich ist. Dies betraf insbesondere die Einbeziehung von Spannungsgrenzwerten (z. B. Formation Integrity Tests oder Informationen zum Spannungsregime) in die Kalibrierung als auch die Kompatibilität mit dem neuen Add-on GeoStress v2.0 (Heidbach et al., 2020), um die Geschwindigkeit und Funktionalität zu erhöhen. Die Version FAST Calibration v2.0 wurde kürzlich veröffentlicht (Ziegler & Heidbach, 2021).

Durch notwendige Personalwechsel und Pandemiebedingt wurden die Arbeiten erschwert, jedoch geht der Projektleiter davon aus, dass die Ziele und der Zeitplan voraussichtlich trotz dieser Widrigkeiten eingehalten werden können.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Für das zweite Halbjahr 2021 sind folgende Arbeitsschwerpunkte geplant:

- Freigabe der Daten für die Erweiterung der Spannungsmagnitudendatenbank
- Testen der Einbindung in die Beta-Version der neuen webbasierten WSM Datenbank basierende auf PostgreSQL
- Anfertigung eines Berichtes zu Ergebnissen der generischen geomechanisch-num. Modelle zum "multi-scale" Ansatz in einem Technischen Berichts in der WSM Serie mit DOI
- Vorbereitung einer Publikation in einem peer-reviewed open access internationalen Journal (wahrscheinlich Solid Earth) und Anfertigen des Abschlussberichtes

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Ziegler, M. O. and Heidbach, O. (2021): Manual of the Matlab Script FAST Calibration v2.0. World Stress Map Technical Report 21-02, GFZ German Research Centre for Geosciences, https://doi.org/10.48440/wsm.2021.002

Ziegler, M. O. and Heidbach O. (2021): Matlab Script FAST Calibration v2.0. GFZ Data Services, https://doi.org/10.5880/wsm.2021.002

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserst                                    | tr. 12, 76131             | 02 E 11637C        |
| Karlsruhe  |                           | 02 E 11057C        |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |
| Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tek- |                           |                    |
| tonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland    |                           |                    |
| (SpannEnD), Teilprojekt C: Geomechanik von Sedimentbecken                              |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle         |                           |                    |
| Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2   |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.01.2018 bis 31.12.2021  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 175.974,00 EUR   | Prof. Dr. Schill          | ing                |

Das tektonische Spannungsfeld in der Erdkruste wirkt sich auf eine Vielzahl der Kriterien zur Standortauswahl für die Entsorgung radioaktiver Abfälle aus. Eine verlässliche Prognose im Vorfeld von Erkundungsmaßnahmen wird allerdings dadurch erschwert, dass das Spannungsfeld in seiner Orientierung und Magnitude nicht einheitlich ist. Vielmehr können in Abhängigkeit vom Untergrundaufbau (Lithologien, Störungen) lokal deutliche Abweichungen von der überregional bekannten Spannungsverteilung auftreten. Um ein prozessbasiertes Verständnis dieser räumlichen Variabilität zu erreichen, wird ein geomechanisch-numerisches 3D-Spannungsmodell für Deutschland (Dimensionen ca. 1200 x 900 x 80 km³) erstellt. Dieses Modell wird an punktuell gemessenen Spannungsdaten kalibriert und ermöglicht auf Basis kontinuumsmechanischer Ansätze Prognosen für Bereiche ohne Spannungsdaten und die Ableitung aller sechs Komponenten des Spannungstensors. Darüber hinaus werden Modellierungswerkzeuge für räumliche Skalen übergreifende Modelle entwickelt. So wird ein konsistenter Spannungsübertrag zwischen dem Deutschland-Modell und ca. drei Größenordnungen kleineren Teilmodellen ermöglicht. Alle Arbeiten liefern die erforderlichen Grundlagen und Modellierungswerkzeuge für zukünftige geomechanische Standortmodelle.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Verbundprojekt gliedert sich in zwei Arbeitspakete (APs):

In AP1 (Teilprojekt A) wird ein großräumiges geomechanisch-numerisches 3D-Spannungsmodell für Deutschland entwickelt, das an allen aktuell verfügbaren Spannungsdaten kalibriert wird.

In AP2 (Teilprojekt B) werden Modellierungstechniken zur Wahl geeigneter, skalenabhängiger Gesteins- bzw. Gebirgsparameter sowie Konzepte für die für ein entsprechendes Modellvolumen erforderlichen repräsentativen Kalibrierungsdaten untersucht.

Weitere Arbeitsziele sind die Weiterentwicklung der Modellierungswerkzeuge, welche die Grundlagen für eine zukünftige Standortcharakterisierung liefern und einen zukünftigen Standortvergleich bezüglich des Spannungsfeldes nach einheitlichen Kriterien ermöglicht und die Erstellung einer Datenbank zu Spannungsmagnituden.

In das Deutschlandmodell wurden keine Störungen implementiert, da diese aufgrund der relativ geringen Deformationsraten in Deutschland und Umgebung auf der hier untersuchten Skala vernachlässigbar sind. Um dennoch das Reaktivierungspotential der tektonischen Störungen im Untergrund abzuschätzen, wurde aus dem Best-Fit Spannungsmodell Deutschland die Slip Tendency (ST) potenzieller Störungen berechnet. Eine Auswahl für das SpannEnD Projekt relevanter Störungen war bereits in der Vergangenheit anhand verschiedener Selektionskriterien getroffen und die Störungsverläufe an der Oberfläche erstellt worden. Die Grundlage für diese Auswahl war ein 900 Störungen umfassender Katalog, der durch das LIAG bereitgestellt und im Anschluss, wo nötig, gefiltert oder erweitert wurde. Zur ST-Berechnung wurden 3D Störungsgeometrien erstellt. Da Informationen über die Geometrie von Störungen jedoch nur sehr limitiert verfügbar sind und nicht für alle selektierten Störungen recherchiert werden konnten, wurden insgesamt drei Geometriesets erstellt: 1) Für alle LIAG-Störungen wurden einfachste Geometrien erstellt, die mit 90 ° einfallen und bis zur Basis der Unterkruste reichen; 2) Für die 56 selektierten Störungen wurde recherchiert, ob es sich um Abschiebungen, Überschiebungen oder Blattverschiebungen handelt und in welche Richtung sie einfallen. Für Abschiebungen wurde ein Einfallen von 60°, für Überschiebungen von 30 ° und für Blattverschiebungen von 90 ° zur Approximation gewählt und die Störungen bis zur Basis der Unterkruste erstellt; 3) Für ein Subset dieser Störungen konnten vertikale Schnitte aus geologischen Profilen und seismischen Sektionen ermittelt werden, auf deren Grundlage semi-realistische Störungsgeometrien erstellt wurden. Zur Erstellung der Störungsgeometrien wurde die Software Rhinoceros 6 genutzt.

Zur ST-Berechnung wird die Software Teeplot 360 und deren AddOn GeoStress verwendet. Zunächst werden die Ergebnisse des Deutschlandmodells (Stand Ahlers et al. 2021 mit einheitlichem Sedimentstapel) importiert und im Anschluss die Hauptspannungen, Scher- und Normalspannungen berechnet. Aus diesen Angaben wird im Anschluss die ST auf den 3D-Störungsflächen berechnet. Dabei wurden vier Szenarien betrachtet: 1) ohne Porendruck; 2) ohne Porendruck, normiert auf einen Reibungswinkel von 30°; 3) mit hydrostatischem Porendruck; 4) mit hydrostatischem Porendruck, normiert auf einen Reibungswinkel von 30°.

Insgesamt fallen die ST-Werte verhältnismäßig niedrig (unkritisch) aus. Erhöhte Werte (potenziell reaktivierbar) liegen besonders im Oberrheingraben, dem Unterrheingraben, der Albstadt Scherzone, der Landshut-Neuötting Störung, der Marianske Lazne Störung und dem Schwäbischen Lineament vor. Erhöht ist ST im Allgemeinen an Störungssegmenten die in einem Winkel 30  $\pm$  10  $^{\circ}$  zur Orientierung der größten Horizontalspannung streichen.

Durch das GFZ wurde ein umfänglicher Katalog seismischer Ereignisse zur Verfügung gestellt. Eine Auswahl dieser Ereignisse (Momentmagnitude >= 3,5) wird mit den ST-Werten der Störungen verglichen. Die Mehrheit der seismischen Ereignisse tritt dabei in einer Tiefe von 8 km auf, weshalb diese Tiefe als Referenztiefe zum Vergleich zwischen Seismizität und ST verwendet wird. Für die meisten Bereiche ergibt sich eine gute Korrelation zwischen erhöhter ST und Auftreten seismischer Ereignisse, jedoch kann nicht alle Seismizität anhand der erhöhten ST erklärt werden.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschließende Auswertung der ST und Fertigstellung einer Publikation
- Teilnahme an GeoKarlsruhe (Vortrag, 19.-24.09.2021) und BASE Forschungssymposium SafeND (Poster, 10.-12.11.2021)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Geplante Poster und Vorträge bei Konferenzen etc. mussten Corona bedingt abgesagt werden.

| Auftragnehmer:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   |                           | 02 E 11647         |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |
| Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern |                           |                    |
| (WiGru 8)  |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2                                     |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.04.2018 bis 30.06.2021  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 1.610.525,00 EUR   | Dr. Noseck                |                    |

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

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

### TA1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

- Verfolgung und Bewertung internationaler Entwicklungen zu offenen Fragen bei einem Safety Case und Einbringung nationaler Interessen in internationale Aktivitäten, insbesondere durch Mitarbeit in internationalen Arbeitsgruppen der OECD/NEA.
- Weiterentwicklung von Strategien und methodischen Vorgehensweisen in der Langzeitsicherheitsanalyse bzw. für den Safety Case.
- Diskussion von eigenen und externen Ergebnissen in nationalen Diskussionsforen zur Erarbeitung gemeinsamer Stellungnahmen und Vorgehensweisen zu ausgewählten Themen der Endlagerung in Deutschland.
- Auswertung neuer wissenschaftlicher Ergebnisse und Aufbereitung zur Verwendung in Instrumentarien für Langzeitsicherheitsanalysen sowie Identifizierung offener Fragen und Initiierung neuer FuE-Projekte.

### TA2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

 Vergleich der Ansätze und Herangehensweisen verschiedener Länder zur Bewertung der Langzeitsicherheit von Endlagern und Weiterentwicklung der eigenen Ansätze. Schwerpunkte sind Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen sowie die Erstellung eines internationalen FEP-Katalogs für Endlager in Salzformationen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### TA1:

 Teilnahme an zwei virtuellen Treffen der IGSC Core Group und an den virtuellen Jahrestreffen der IGSC und des RWMC. Teilnahme an einem Bureau Meetings der IDKM Gruppe der NEA und zwei Bureau Meeting der Expert Group on Archiving (EGAR). Teilnahme am ersten IDKM Plenary-Meeting mit Vorstellung der geplanten Arbeiten zum Set of Essential Records (SER). Leitung der SER Task Group und Organisation und Durchführung von zwei Arbeitstreffen.

- Teilnahme am Online-Meeting der Task Force on EBS.
- Vorbereitung eines Benchmarks für ein Endlager im Salzgestein im internationalen Vorhaben DECOVALEX 2023, Task F.
- Der Test im Rahmen der Machbarkeitsstudie zur Visualisierung von Einfriervorgängen in Klüften wurde mehrmals durchgeführt und mit Erfolg fortlaufend verbessert. Ein COMSOL-Modell zur Simulation der Permafrosttiefe im Kristallin konnte erstellt und für den kanadischen Schild bestätigt werden.
- Durchführung von Modellrechnungen mit aktuellen thermodynamischen Modellansätzen zur Rückhaltung ausgewählter, relevanter Elemente (Radionuklide) in repräsentativen Referenzböden der Biosphäre. Vergleich der Ergebnisse mit den in den Biosphärenmodellen der Langzeitsicherheitsanalyse verwendeten Daten zur Radionuklidrückhaltung im Boden.
- Durchführung eines Webinars (online) zum Thema "Research methods and modern measuring equipment used for site and rock characterization", Planung des 4. Crystalline Club Plenary Meetings (CRC-4) im Juni 2021 in Deutschland (alternativ online), inkl. Topical Session zum Thema "Transfer of data for the compilation of both descriptive and safety assessment models". Teilnahme am CRC Bureau Meeting und an der 22. Sitzung der IGSC. TA2:
- Weiterführung der Analyse von Modellsystemen anderer Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA) und Diskussion der Ergebnisse in internationaler Kooperation. Erstellung eines gemeinsamen Zwischenberichts (als Sandia-Report) zur Dokumentation der bisherigen Ergebnisse. Durchführung einer Reihe von virtuellen Abstimmungsgesprächen mit den Partnern sowie einer virtuellen Veranstaltung zur Präsentation und Diskussion der bisherigen Ergebnisse im erweiterten Rahmen unter Einbeziehung von Teilnehmern des EURAD-Projekts (UMAN, DONUT).

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine. Das Vorhaben wurde am 30.06. 2021 abgeschlossen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Noseck, U. et al.: Scientific Basis for a Safety Case of Deep Geological Repositories. Final Report. FKZ 02E11647 (BMWi) Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)gGmbH. GRS-643. September 2021

Becker, D.-A. et al.: Sensitivity Analysis Comparisons on Geologic Case Studies: An International Collaboration. Sandia Report (to be published)

| Auftragnehmer:  |                           | Förderkennzeichen: |
|---|---------------------------|--------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln  |                           | 02 E 11658A        |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                    |
| Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-End- |                           |                    |
| lagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt A                     |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle        |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2  |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.10.2018 bis 30.04.2022   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                    |
| 568.700,00 EUR  | Dr. Rübel                 |                    |

Um die im Rahmen von ANSICHT-I entwickelte Nachweismethodik zu prüfen, sollen im Rahmen von ANSICHT-II noch ausstehende Einzelnachweise demonstrativ dargestellt und damit die Nachweisführung illustriert werden. Offene Fragen im Nachweissystem, die zur einwandfreien Nachweisführung geklärt werden müssen, sollen identifiziert und klar dargestellt werden. Ziel ist es, durch die Gesamtschau der Einzelnachweise, die in ANSICHT-I entwickelte Nachweismethodik zu evaluieren, ggf. Schwachstellen aufzuzeigen und Verbesserungsansätze zu liefern. Darüber hinaus wird diese Betrachtung aufzeigen, welche Daten, im Rahmen einer Standorterkundung, zielgerichtet erhoben werden müssen, damit die Nachweise Integrität der geologischen Barriere, Integrität der geotechnischen Barrieren und Radiologischer Nachweis, in geeigneter Weise geführt werden können.

Die Bearbeitung wird gemeinsam durch BGR, GRS und BGE TECHNOLOGY durchgeführt.

- AP1: Darstellung und Evaluierung des Integritätsnachweises für die geologische Barriere
- AP2: Darstellung und Evaluierung der Integritätsnachweise für das geotechnische Barrieresystem
- AP3: Darstellung des radiologischen Nachweises
- AP4: Berichtswesen
- GRS ist federführend für das Arbeitspaket 3. Dieses gliedert sich in die Unteraufgaben:
- AP3.1: 3D-Radionuklid-Transportrechnungen mit d<sup>3</sup>f++
- AP3.2: Integrierte 1D-Radionuklid-Transportrechnungen mit CLAYPOS
- AP3.3: Integrierte Radionuklid-Transportrechnungen mit REPOTREND
- AP3.4: Rechnungen zum Radionuklidtransport in der Gasphase mit TOUGH2
- AP3.5: Bewertung

- AP1: Diskussion mit BGETEC und BGR über das in § 5 der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung definierte Kriterium zu den Änderungen der chemischen Verhältnisse im Einlagerungsbereich. Screening von Stoffen und Prozessen, die eventuell zur Bewertung dieses Kriterium zu berücksichtigen sind. Literaturrecherche zum potenziellen Einfluss von Korrosionsprodukten aus der Metallkorrosion auf die Eigenschaften des Wirtsgesteins.
- AP3.1: Es wurden die vom Unterauftragnehmer TECHSIM durchgeführten Entwicklungen am Code d<sup>3</sup>f++ getestet. Die Parameter für die im Modell zu berücksichtigenden Prozesse und abzubildenden Geometrien (Endlagergebäude) wurden in das d<sup>3</sup>f++-Modell übernommen und erste Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung und dem Radionuklidtransport durchgeführt.
- AP3.2: Es wurden Auswertungen der mit dem langzeitsicherheitsanalytischen Instrumentarium durchgeführten Rechnungen zur Radionuklidfreisetzung aus dem Endlager der Standortmodelle Nord und Süd vorgenommen, um die in § 4 der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung definierten Kriterien zum sicheren Einschluss zu berechnen und miteinander, mit der effektiven Dosis und dem bisherigen Indikator des RGI zu vergleichen.
- AP3.4: Es wurden Testfälle diskutiert und definiert anhand derer der Einfluss von Inhomogenitäten (sandigeren Lagen) im Wirtsgestein auf den Gas- und Radionuklidtransport im TOUGH2-Modell untersucht werden soll. Die ausgewählten Testfälle umfassen eine Inhomogenität, die das Wirtsgestein schneidet und in vertikaler Richtung in das Wirtsgestein hineinreicht, wobei a.) der Rand des ewG nicht erreicht wird b.) der Rand des ewG im Hangenden und c.) der Rand des ewG im Hangenden und Liegenden erreicht wird. Variationen über die Anzahl der betroffenen Einlagerungsstrecken wurden diskutiert. Es wurde festgelegt, dass die Inhomogenität bezüglich der Permeabilität den Mindestanforderungen des StandAG entsprechen soll.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fortführung der Diskussion und des Reviews über das in § 5 der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung definierte Kriterium zu den Änderungen der chemischen Verhältnisse im Einlagerungsbereich.
- AP3.1: Fortführung der Modellrechnungen mit d<sup>3</sup>f++ zur Modellierung der Grundwasserbewegung und des Radionuklidtransports. Weiteres Debugging der neu implementierten Schnittstelle.
- AP3.4: Modifikation des Modells und Durchführung von Rechnungen mit TOUGH2 zur Untersuchung des Einflusses von Inhomogenitäten im Wirtsgestein auf den Gas- und Radionuklidtransport.
- AP3.5: Dokumentation der durchgeführten Arbeiten für den Abschlussbericht.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:  |                           | Förderkennzeichen: |
|---|---------------------------|--------------------|
| BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine                                       |                           | 02 E 11658B        |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                    |
| Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-End- |                           |                    |
| lagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt B                     |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle        |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2  |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.10.2018 bis 30.04.2022   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                    |
| 609.290,12 EUR  | Jobmann                   |                    |

Um die im Rahmen des Vorhabens ANSICHT entwickelte Nachweismethodik zu prüfen, sollen im Rahmen dieses Vorhabens noch ausstehende Einzelnachweise demonstrativ dargestellt und damit die Nachweisführung illustriert werden. Offene Fragen im Nachweissystem, die zur einwandfreien Nachweisführung geklärt werden müssen, sollen identifiziert und klar dargestellt werden. Ziel ist es, durch die Gesamtschau der Einzelnachweise die in ANSICHT entwickelte Nachweismethodik zu evaluieren, ggf. Schwachstellen aufzuzeigen und Verbesserungsansätze zu liefern. Darüber hinaus soll diese Betrachtung aufzeigen, welche Daten, im Rahmen einer Standorterkundung, zielgerichtet erhoben werden müssen, damit ein Nachweis in geeigneter Weise geführt werden kann.

Um diese Ziele zu erreichen, werden sämtlicher Einzelnachweise, die für ein komplettes geotechnisches Barrierensystem im Tonstein durchgeführt werden müssten, illustrativ ausgeführt. Gegebenenfalls werden Anpassungen an den Konzepten vorgenommen, die eine verbesserte Nachweisführung erlauben.

- AP1: Darstellung und Evaluierung des Integritätsnachweises für die geologische Barriere (Federführung BGR)
- AP2: Darstellung und Evaluierung der Integritätsnachweise für das (geo)technische Barrierensystem (Federführung BGETEC)
- AP3: Darstellung des radiologischen Nachweises am Rand des ewG (Federführung GRS)
- AP4: Berichtswesen (Federführung (BGETEC)

Im Rahmen des AP2 wurde der Berichtsentwurf zur Nachweisführung für geotechnische Barrieren eines HAW Endlagers im Tongestein komplett überarbeitet. Verschlussbauwerke werden gemäß § 2 der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung unterteilt in "wesentliche" Barrieren und "weitere" Barrieren. Im Rahmen des Verschlusskonzeptes wurde eine entsprechende Einteilung vorgenommen. In diesem Zusammenhang werden den wesentlichen Barrieren "Sicherheitsfunktionen" und den weiteren Barrieren "Schutzfunktionen" zugeordnet. Damit diese Sicherheits- oder Schutzfunktionen von den einzelnen Komponenten auch übernommen werden können, wurden jeder Komponente bestimmte Leistungsziele zugeordnet; Leistungsziele, die von jeder Komponente erreicht werden müssen, damit sie die ihnen zugedachte Funktion an der ihnen zugedachten Position auch erfüllen können. Basierend auf diesen Leistungszielen wurden anschließend Designanforderungen an die Bauwerksmodule spezifiziert, damit gewährleistet werden kann, dass diese Leistungsziele auch erreicht werden können.

Im Rahmen des AP4 wurden im Berichtszeitraum Einzelnachweise zur Filterstabilität von Barrierekomponenten geführt und dokumentiert.

Anhand der Berechnungsergebnisse des Verbundpartners GRS bezüglich der Gasentwicklung durch Korrosion und Ausbreitung wurde die Verschlusskonfiguration in den Bohrlochüberfahrungsstrecken für das Konzept der vertikalen Bohrlochlagerung geändert. Um die ggf. zu erwartenden Gasmengen zu beherrschen, wird als Material für den Versatz in der Bohrlochüberfahrungsstrecke jetzt reiner Schotter vorgesehen und nicht mehr ein Gemisch aus aufbereitetem Ausbruchsmaterial und Bentonit. Der Schotter dient mit seiner hohen Porosität als dezentraler Speicher zur Aufnahme von Korrosionsgasen aus den Einlagerungsbohrungen. Diesem Versatzmaterial wird nunmehr keinerlei Dichtwirkung zugeschrieben. Die Dichtheitsanforderungen für alle anderen Strecken wie Querschlägen und Zugangsstrecken bleibt bestehen. Das Verschlusskonzept wurde entsprechend neu konfiguriert.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- Durchführung weiterer Einzelprüfungen zur Integrität der geotechnischen Verschlussbauwerke zur Illustration der Vorgehensweise.
- Dokumentation der Ergebnisse der Integritätsbewertungen in Berichtsform.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:  |                           | Förderkennzeichen: |
|---|---------------------------|--------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln  |                           | 02 E 11668A        |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                    |
| Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teil- |                           |                    |
| projekt A   |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle                      |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2  |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.09.2018 bis 31.05.2024   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                    |
| 1.249.122,00 EUR  | Dr. Noseck                |                    |

Das Verbundprojekt SMILE (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (HZDR) und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) basiert auf den Erkenntnissen der Vorhaben ESTRAL und WEIMAR, in denen das Smart-Kd Konzept für Langzeitsicherheitsanalysen entwickelt, optimiert und in das Rechenprogramm r³t implementiert wurde. In SMILE sollen (i) das bisher entwickelte Konzept um den Einfluss von Redoxreaktionen erweitert, (ii) die chemische Beschreibung durch die Ermittlung der Stöchiometrie, Struktur und thermodynamischer Parameter wichtiger Oberflächenkomplexe weiter untermauert, (iii) unterschiedliche State-of-the-art Oberflächenkomplexmodelle zur Auswertung von vorhandenen experimentellen Daten angewandt, (iv) die Sorptions-Datenbasis durch geeignete Batch- und Säulenexperimente weiter ergänzt und (v) das Konzept durch gezielte Experimente und Modellierung von naturnahen Systemen kritisch überprüft werden. Das hier zu entwickelnde Konzept wird sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar sein und somit auch einen Wissenstransfer zu anderen Forschungsfeldern gestatten.

- AP1: Konzepterweiterung
  - (Weiterentwicklung des konzeptuellen Modells: Implementierung von Redox-Prozessen, Erarbeitung eines Konzepts zur Berücksichtigung organischer Liganden)
- AP2: Verifizierung des erweiterten WEIMAR-Konzepts (Vergleichsrechnungen für einfache Testfälle mit PHREEQC bzw. PHAST
- AP3: Titrations-, Sorptions- und Transportexperimente (Durchführung von Laborexperimente u. a. im Rahmen von Bachelor-/Masterarbeiten)
- AP4: Parametrisierung und Berechnung von Smart-K<sub>d</sub>-Matrizen (Ableitung thermodynamischer Sorptionsdaten und K<sub>d</sub>-Berechnung für das erweiterte Konzept)
- AP5: Großräumige Anwendungsrechnungen (Strömungs- und Transportrechnungen für ausgewählte Modellgebiete)
- AP6: Qualitätsmanagement/Dokumentation/Internetseite

- AP1: Weiterbearbeitung des Konzepts zur Implementierung von Redoxprozessen in d<sup>3</sup>f++, bessere Konvergenz (Robustheit und Geschwindigkeit) über alternative Numerik-Routinen.
- AP2: Simulationsrechnungen mit d<sup>3</sup>f++ zu verschiedenen Testfällen (mit Calcit, ohne Calcit) zur Überprüfung der aktuellen Implementierung des Smart-K<sub>d</sub>-Konzepts, regelmäßige Treffen mit dem HZDR zur genaueren Analyse der Simulationsergebnisse in Bezug auf die Datenbasis.
- AP3: Betreuung und Auswertung von Säulenversuchen in Systemen mit Ni unter anderem bei erhöhter Ionenstärke und in Konkurrenz mit Eu.
- AP5: Erstellung des konzeptuellen Modells zur Simulation großräumiger Strömungs- und Transportvorgänge unter Anwendung des neuen Konzepts zur Implementierung der geochemischen Prozesse und des Einflusses auf die Sorption.
- AP6: Online-Projekttreffen mit den Verbundpartnern GRS und KIT-INE, Update der Internet-Präsenz unter "www.smartkd-concept.de".

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weiterentwicklung des Konzepts zur Implementierung von Redoxprozessen.
- AP2: Fortführung der Verifikationsrechnungen zu den verschiedenen Testfällen mit d<sup>3</sup>f++. Weiterentwicklung der Veröffentlichung.
- AP3: Planung und Durchführung der Bestimmung von Sorptionsisothermen zum Kationenaustausch von Muskovit. Bestimmung von Selektivitätskoeffizienten für relevante Kationen und Europium.
  - Planung und Durchführung von Batchversuchen zum Sorptionsverhalten von Ni an Orthoklas in Konkurrenz mit Ca und an Quarz in Konkurrenz mit Eu.
  - Auswertung der Säulenexperimente zum Transport von Europium in Säulen mit synthetischen Sedimenten (80 % Quarz, 10 % Orthoklas, 10 % Muskovit) unter Einbeziehung der neu bestimmten Selektivitätskoeffizienten für Muskovit.
- AP5: Durchführung und Dokumentation der großräumigen Strömungs- und Transportrechnungen unter Anwendung des neuen Konzepts. Überprüfung der Ergebnisse hinsichtlich der Einflüsse verschiedener klimatischer Zustände auf die Radionuklidrückhaltung.
- AP6: Projekttreffen mit GRS und KIT-INE (online oder in Karlsruhe) sowie Arbeitstreffen mit dem G-CSC Frankfurt zur Codierung. Kontinuierliche Pflege der Internet-Präsenz.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Neumann, J., Brinkmann, H., Britz, S., Lützenkirchen, J., Bok, F., Stockmann, M., Brendler, V., Stumpf, T., Schmidt, M., (2021): A comprehensive study of the sorption mechanism and thermodynamics of f-element sorption onto K-feldspar. J. Colloid Interface Sci. 591, 490-499. https://doi.org/10.1016/j.jcis.2020.11.041

| Zuwendungsempfänger:  |                 | Förderkennzeichen: |
|---|-----------------|--------------------|
| Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr.                                 |                 | 02 E 11668B        |
| 400, 01328 Dresden  |                 | 02 E 11000B        |
| Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), |                 |                    |
| Teilprojekt B   |                 |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle                |                 |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2  |                 |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra  | um:                |
| 01.09.2018 bis 28.02.2022   | 01.01.2021 bis  | 30.06.2021         |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:  |                    |
| 580.851,00 EUR  | Prof. Dr. Brend | ller               |

Das Verbundprojekt SMILE (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) basiert auf den Erkenntnissen der Vorhaben ESTRAL und WEIMAR, in denen das Smart-K<sub>d</sub> Konzept für Langzeitsicherheitsanalysen entwickelt, optimiert und in das Rechenprogramm r³t implementiert wurde. In SMILE sollen (i) das bisher entwickelte Konzept um den Einfluss von Redoxreaktionen erweitert, (ii) die chemische Beschreibung durch die Ermittlung der Stöchiometrie, Struktur und thermodynamischer Parameter wichtiger Oberflächenkomplexe weiter untermauert, (iii) unterschiedliche State-of-the-art Oberflächenkomplexmodelle zur Auswertung von vorhandenen experimentellen Daten angewandt, (iv) die Sorptions-Datenbasis durch geeignete Batch- und Säulenexperimente weiter ergänzt und (v) das Konzept durch gezielte Experimente und Modellierung von naturnahen Systemen kritisch überprüft werden. Das hier zu entwickelnde Konzept ist sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar und gestatte somit auch einen Wissenstransfer zu anderen Forschungsfeldern.

- AP1: Konzepterweiterung
  - (Weiterentwicklung des konzeptuellen Modells: Implementierung von Redox-Prozessen, Erarbeitung eines Konzepts zur Berücksichtigung organischer Liganden)
- AP2: Verifizierung des erweiterten WEIMAR-Konzepts (Vergleichsrechnungen für einfache Testfälle mit PHREEQC bzw. PHAST
- AP3: Titrations-, Sorptions- und Transportexperimente
- (Durchführung von Laborexperimente u. a. im Rahmen von Bachelor-/Masterarbeiten)
  AP4: Parametrisierung und Berechnung von Smart-K<sub>d</sub>-Matrizen
- (Ableitung thermodynamischer Sorptionsdaten und K<sub>d</sub>-Berechnung für das erweiterte Konzept)
- AP5: Großräumige Anwendungsrechnungen
  - (Strömungs- und Transportrechnungen für ausgewählte Modellgebiete)
- AP6: Qualitätsmanagement/Dokumentation/Internetseite

- AP1: Implementierung von Redoxprozessen in d³f++, bessere Konvergenz (Robustheit und Geschwindigkeit) über alternative Numerik-Routinen.
- AP2: Vergleichsrechnungen für einfache Testfälle mit PHREEQC bzw. PHAST erfolgten, anschließend wurden die SMILE-Datenbank und der d³f++ Code optimiert
- AP3: Aufnahme und erste Analyse neuer SXRD Daten von M³+ auf K-Feldspat mit neuem Substrat, Start analoger Messungen mittels ortsaufgelöster TRLFS Zetapotential-, Batchsorptions- und TRLFS-Experimente an Ca-Feldspäten Sorption von M³+ auf Muskovit: Mineralcharakterisierung, Sorptionsexperimente und TRLFS, Entwicklung eines Oberflächenkomplexierungsmodells (SCM) Zetapotential-Messungen verschiedener Phyllosilikate (Chlorit, Biotit, Clinochlor, Antigorit). Für M³+ Batchsorptions-, Isothermen-, und TRLFS-Experimente
- AP4: Erstellung neuer Smart-K<sub>d</sub>-Matrizen auf Basis eines Updates von SMILE.dat
- AP6: Online-Projekttreffen mit den Verbundpartnern GRS und KIT-INE, Update der Internet-Präsenz unter "www.smartkd-concept.de"

## 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Weiterentwicklung von Modellen zur Auswertung der SXRD Daten an Orthoklas Entwicklung eines SCM für Ca-Feldspäte und Veröffentlichung der Ergebnisse Veröffentlichung der Ergebnisse zur Sorption von M³+ auf der Muskovit(001)-Basalfläche in Gegenwart von Sulfat, Anpassung des SCM für Muskovit bzgl. Oberflächenpräzipitate (Gibbsit), Fertigstellung des Manuskripts

  TRLFS für Sorption von M³+ an Phyllosilikat mit geringem Fe-Gehalt. Entwicklung eines generischen SCM für Phyllosilikate, Vorbereitung eines Manuskripts

  Entwicklung eines SCM für Chlorite, Untersuchung des Einbaus von M³+ in Chlorite
- AP4: Umfangreiche SCM-Datenvalidierung für Sorptionssysteme mit Th und Se zur Verbesserung der internen Konsistenz von SMILE.dat.
- AP6: Projekttreffen mit GRS und KIT-INE (online oder in Karlsruhe) sowie Arbeitstreffen mit dem G-CSC Frankfurt zur Codierung, kontinuierliche Pflege der Internet-Präsenz

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Neumann J., Brinkmann H., Britz S., Lützenkirchen J., Bok F., Stockmann M., Brendler V., Stumpf T. and Schmidt M. (2021): A comprehensive study of the sorption mechanism and thermodynamics of f-element sorption onto K-feldspar. J. Colloid Interface Sci. 591, 490–499. https://doi.org/10.1016/j.jcis.2020.11.041

Neumann, J., Qiu, C., Eng, P., Skanthakumar, S., Soderholm, L., Stumpf, T., Schmidt, M. (2021): Effect of Background Electrolyte Composition on the Interfacial Formation of Th(IV) Nanoparticles on the Muscovite (001) Basal Plane, Journal of Physical Chemistry C XXX, XXX-XXX. Accepted

Stockmann, M.: Smart K<sub>d</sub>-concept as efficient approach to improve geochemistry in reactive transport modelling for repository safety assessment. Vortrag bei 2. Tage der Standortauswahl der BGE, Virtual conference, 11.–12.02.2021

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für                      |                           | 02 E 11668C        |
| Technologie(KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz                                  | 1, 76344 Eg-              | 02 E 11008C        |
| genstein-Leopoldshafen   |                           |                    |
| Verbundprojekt: Smart-Kd in der Langzeitsicherhe                               | itsanalyse - Anw          | rendungen (SMILE), |
| Teilprojekt C  |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2                                     |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.09.2018 bis 28.02.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 117.142,34 EUR   | Dr. Lützenkirch           | nen                |

Das Verbundprojekt SMILE (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (HZDR) und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) basiert auf den Erkenntnissen der Vorhaben ESTRAL und WEIMAR, in denen das Smart-K<sub>d</sub> Konzept für Langzeitsicherheitsanalysen entwickelt, optimiert und in das Rechenprogramm r³t implementiert wurde. In SMI-LE sollen (i) das bisher entwickelte Konzept um den Einfluss von Redoxreaktionen erweitert, (ii) die chemische Beschreibung durch die Ermittlung der Stöchiometrie, Struktur und thermodynamischer Parameter wichtiger Oberflächenkomplexe weiter untermauert, (iii) unter-schiedliche State-of-the-art Oberflächenkomplexmodelle zur Auswertung von vorhandenen experimentellen Daten angewandt, (iv) die Sorptions-Datenbasis durch geeignete Batch- und Säulenexperimente weiter ergänzt und (v) das Konzept durch gezielte Experimente und Modellierung von naturnahen Systemen kritisch überprüft werden. Das hier zu entwickelnde Konzept wird sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar sein und somit auch einen Wissenstransfer zu anderen Forschungsfeldern gestatten.

- AP1: Konzepterweiterung
  - (Weiterentwicklung des konzeptuellen Modells: Implementierung von Redox-Prozessen, Erarbeitung eines Konzepts zur Berücksichtigung organischer Liganden)
- AP2: Verifizierung des erweiterten WEIMAR-Konzepts (Vergleichsrechnungen für einfache Testfälle mit PHREEQC bzw. PHAST
- AP3: Titrations-, Sorptions- und Transportexperimente (Durchführung von Laborexperimente u. a. im Rahmen von Bachelor-/Masterarbeiten)
- AP4: Parametrisierung und Berechnung von Smart-K<sub>d</sub>-Matrizen (Ableitung thermodynamischer Sorptionsdaten und K<sub>d</sub>-Berechnung für das erweiterte Konzept)
- AP5: Großräumige Anwendungsrechnungen (Strömungs- und Transportrechnungen für ausgewählte Modellgebiete)
- AP6: Qualitätsmanagement/Dokumentation/Internetseite

AP3: Austausch und Vorbereitung von Proben für die EXAFS Messungen zur Adsorption von Eu an Quartz und amorphem silica. Zudem wurden auch Proben für das System Ni an Quartz und amorphem silica ausgetaucht. Die EXAFS Messungen wurden durchgeführt. Die Daten werden derzeit ausgewertet.

Austausch zum Einfluss von Aluminium (Al(III), welches sich aus dem Feststoff auflöst und dann wieder am Feststoff adsorbieren kann, bspw. bei steigendem pH-Wert, und Konkurrenz-Reaktionen mit bspw. Eu auslöst) auf die Adsorption von dreiwertigen Lanthaniden an Feldspäten.

AP3: Virtuelles Projekt Meeting.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

AP3: Weitere Untersuchungen zum Al(III) Einfluss. Säure-Base Titrationen an weiteren Feldspat Proben und Zeta-Potentialmessungen.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Neumann, J; Brinkmann, H; Britz, S; Lützenkirchen, J; Bok, F; Stockmann, M; Brendler, V; Stumpf, T; Schmidt, M: A comprehensive study of the sorption mechanism and thermodynamics of f-element sorption onto K-feldspar. Journal of colloid and interface science, 591 (2021) 490-499

| Auftragnehmer:  |   | Förderkennzeichen:        |  |
|---|---|---------------------------|--|
| BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 3   | BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine |                           |  |
| Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen zur Vervollständigung von Stoffmodellen für Salz- oder Sorelbeton sowie spezieller low-ph und hochdichter bzw. hochfester Betone zum rechnerischen Nachweis der Rissbeschränkung für Bauwerke (UVERSTOFF)  Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3 |   |                           |  |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra                                  | um:                       |  |
| 01.09.2018 bis 30.04.2021   | 01.01.2021 bis                                  | 01.01.2021 bis 30.04.2021 |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:                                  |                           |  |
| 304.370,76 EUR  | Dr. Müller-Ho                                   | eppe                      |  |

Bei allen Endlagerkonzepten in den unterschiedlichen Wirtsgesteinen Salz, Tongestein und Kristallin werden im Zusammenhang mit dem jeweiligen Verschlusssystem Funktionselemente aus Beton verschiedener Rezepturen eingesetzt. Wird dem Funktionselement aus Beton eine Barrierefunktion zugeordnet, ist der Integritätsnachweis, d. h. der Nachweis der Rissbeschränkung, zu führen, da andernfalls die hydraulische Durchlässigkeit des Gesamtsystems durch die Risse bestimmt wird. In einem HAW-Endlager ist dabei zu berücksichtigen, dass Betonbarrieren, die in der Nähe von Einlagerungsfeldern angeordnet sind, nach ihrer Erhärtung zu einem späteren Zeitpunkt erhöhten Temperaturen ausgesetzt sind. Daraus resultiert die spezifische Anforderung, den Integritätsnachweis für eine thermische Einwirkung nach Erhärtung zu führen. Dabei sind die viskosen Materialeigenschaften des Betons im Hinblick auf den Abbau von potenziell rissinduzierenden Zwangs- und Eigenspannungen von hoher Bedeutung. Eine thermische Aktivierung des viskosen Verhaltens wird in den Stoffmodellen für den Integritätsnachweis bisher nicht erfasst, obwohl Indexversuche einen solchen Einfluss aufzeigen. Ein geeignetes, verfügbares Stoffmodell für Beton soll so erweitert werden, dass der Einfluss der thermischen Aktivierung bei der rechnerischen Simulation erfasst wird.

- AP1: Zusammenstellung vorhandener und Auswahl geeigneter Teilstoffmodelle zur Modellierung des Betonverhaltens (Salz- und Sorelbeton sowie low-ph-Beton)
- AP2: Ermittlung und Zusammenstellung versuchstechnischer Grundlagen
- AP3: Qualifizierung der Teilstoffmodelle
- AP3.1: Überprüfung/Validierung der Teilstoffmodelle
- AP3.2: Übertragung der Ergebnisse für das Betonverhalten, ggf. von Teilstoffmodellen, auf low-ph-Beton
- AP3.3: Weitergehende Qualifizierung des Stoffmodells
- AP4: Abschlussbericht

- AP1: Der bisher implementierte Ansatz, der die erwarteten Mechanismen synthetisch wiedergibt, diente als Grundlage für AP2 und AP3. Er wurde jedoch im Ergebnis von AP2 und AP3 modifiziert, worauf nachstehend eingegangen wird.
- AP2: Die Zusammenstellung versuchstechnischer Grundlagen für den Sorelbeton wurde um die zusätzlich von der GRS bereitgestellten Versuchsergebnisse erweitert und damit die Entscheidungsgrundlage für den zu behandelnden Trend bereitgestellt. Eine Neuidentifikation der Parameter wurde allerdings bis zu dem Zeitpunkt zurückgestellt, bis die Betrachtung der Versuchsergebnisse zeigte, dass die Fragestellung des generell zu steifen Verhaltens bei der Nachrechnung der Versuche aufgelöst ist. Der Schwerpunkt lag deshalb auf den Parametervariationen in AP3. Nach Abschluss der Parametervariationen wurde ein Parametersatz identifiziert, der alle Versuche abbildet soweit die Prozesse im Ergebnis von AP1 angesetzten Stoffmodell erfasst werden.
- AP3: Um die maßgeblichen Parameter für das zu steife Verhalten zu ermitteln, wurden weitergehende Parametervariationen durchgeführt. Frühere Ergebnisse von Variationen, die zeigen, dass die meisten Parameter das Ergebnis nicht maßgeblich beeinflussen, haben sich bestätigt. Auch bestätigte sich, dass nur wenige einen maßgeblichen Einfluss ausüben, worunter allerdings auch solche fallen, die als gesichert bekannt gelten, wie z. B. das Elastizitätsmodul. Im Ergebnis der Variationen erfolgte auch gegenüber dem unter AP1 ausgewählten Ansatz eine weitergehende Separierung von Einflüssen, die auf den Kugeltensor wirken und auf den Deviator. Durch diese zusätzliche Separierung ließen sich alle Versuche mit gleichen Parametersätzen anpassen. Eine Ausnahme bildet ein Verzögerungseffekt, der nach einer Temperaturstufe mit Temperaturabsenkung auftritt und der erst durch die vorlaufenden Ergebnisse erkannt werden konnte. Da dieser Effekt in dem Stoffmodellansatz gemäß AP1 nicht vorhanden ist, kann er auch nicht abgebildet werden. Jedoch lässt sich festhalten, dass alle im Stoffmodell nach AP1 vorhandenen Teilstoffmodelle sich bewährt haben.

Begleitend wurde recherchiert, wie sich die erkannten Effekte interpretieren lassen.

AP4: Die Erstellung des Abschlussberichtes wurde weitergeführt.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Keine, Projektende AP2: Keine, Projektende AP3: Keine, Projektende

AP4: Abschluss der Berichtserstellung

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen:     |
|--|---------------------------|------------------------|
| Technische Universität Clausthal, Adolf-Römer-Str. 2a, 38678                   |                           | 02 E 11688             |
| Clausthal-Zellerfeld   |                           | 02 E 11088             |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                        |
| Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschi                               | nittblöcken - Du          | rchführung, Auswertung |
| und Reanalyse von THM-Versuchen (Salzschnittblöcke III)                        |                           |                        |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                        |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                       |                           |                        |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                    |
| 01.09.2018 bis 31.08.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                        |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                        |
| 616.650,00 EUR   | Prof. Dr. Düste           | rloh                   |

Durchführung, Auswertung und numerisch-rechnerische Reanalyse von Technikumsversuchen an Großprüfkörpern aus Salzschnittblöcken mit und ohne Fugenfüllung zur Untersuchung der Dicht- und Tragwirkung des Systems unter in situ relevanten THM-Belastungen. Bezug zu anderen Vorhaben: Für die Reanalyse von Abdichtungssystemen aus Salzschnittblöcken mit Fugenfüllung aus Salzgrus werden die im Rahmen des Forschungsvorhabens KOMPASS (02E11708D) erarbeiteten Ergebnisse zur stoffmodelltheoretischen Charakterisierung von Salzgrus integriert.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Beschaffung von gewachsenem Steinsalz

AP2: Herstellung von Salzschnittblöcken

AP3: Durchführung und Auswertung von Technikumsversuchen unter variierten THM-Beanspruchungen

AP4: Rechnerische Reanalyse der Technikumsversuche mit Verifikation, Validation und Ertüchtigung/Erweiterung der Berechnungssoftware

AP5: Erstellung Schlussbericht

# 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: abgeschlossen.

AP2: Herstellung von Salzschnittblöcken für einen zweiten Prüfkörper ohne Fugenfüllung abgeschlossen.

Weiterführung der Herstellung von Salzschnittblöcken für einen Prüfkörper mit Fugenfüllung.

AP3: Abschluss des hydromechanischen Kompaktionsversuchs mit Messung der Gaspermeabilität des Salzschnittblockprüfkörpers bei variierten Differenzdrücken zwischen mechanischer Spannung (Manteldruck  $\sigma_3$  /Axialdruck  $\sigma_1$ ) und Fluiddruck  $p_{gas}$  wie folgt:

 $\sigma_1/\sigma_3 = 13,0$ MPa/12,5MPa;  $\sigma_3$ -p<sub>gas</sub> = 0,5MPa, 1,5MPa, 2,5MPa, 3,5MPa, 4,5MPa;  $\sigma_1/\sigma_3 = 9,0$ MPa/8,5MPa;  $\sigma_3$ -p<sub>gas</sub> = 0,5MPa, 1,5MPa, 2,5MPa, 3,5MPa, 4,5MPa.

AP4: Rechnerische Simulation zur Laborversuchsanalyse:

Rechnerische Simulationen mit Idealisierung der Salzschnittblockfugen durch Salzgrus-Elemente; Stoffmodell Salzgrus: C-WIPP-TUC-2021:

- Rechnerische Simulationen zur Prüfung der grundsätzlichen numerischen Korrektheit/Plausibilität an Funktionsmodellen mit isolierter Betrachtung unterschiedlicher Arten von Fugen (vertikal, horizontal und tangential) und deren Auswirkung auf die Spannungsverteilung in der Salzschnittblockkonstruktion.

- Rechnerische Simulationen zur Übertragbarkeit der Randbedingung einer Axialverzerrungsrate von 0 als Idealisierung der laborativ realisierten Randbedingung einer Axialdeformationstoleranz von 0.2 mm.
- Rechnerische Simulationen mit dem Berechnungsmodell für die Salzschnittblockkonstruktion mit Fugenfüllung und einer Fugenbreite von 5 mm unter hydromechanischen Randbedingungen.
- Rechnerische Simulationen mit einem Teilmodell von 0,3 m Höhe und einer Fugenbreite von 0,1 mm unter mechanischen Randbedingungen zur Analyse einer aus Symmetriegründen ggf. möglichen Reduktion des Berechnungsmodells.

Rechnerische Simulationen mit Idealisierung der Salzschnittblockfugen durch Interface-Flächen:

- Rechnerische Simulationen zur Prüfung der grundsätzlichen Eignung der Interface-Elemente an Funktionsmodellen mit isolierter Betrachtung unterschiedlicher Arten von Fugen (vertikal, horizontal und tangential) durch einen Vergleich der Berechnungsergebnisse mit den korrespondierenden Ergebnissen aus (1).

Rechnerische Simulationen zur Analyse einer Schachtverschlusselementbelastung unter In-situ-Bedingungen:

- Rechnerische Simulationen zur Ableitung einer realitätsnahen Belastungshistorie für die Beanspruchung der Salzschnittblockkonstruktion für die Lastfälle "SSB-Schacht" und "SSB-Strecke" zum Vergleich mit den im Labor realisierten und realisierbaren Versuchsrandbedingungen. Für diese Zielsetzungen wurde eine idealisierte Abbildung der Salzschnittblockkonstruktion verwendet (homogenisiert als ein fiktiv intensiv vorverdichteter Salzgrus).
- Rechnerische Simulationen zur Untersuchung des hydraulisch-mechanischen Verhaltens der Salzschnittblockkonstruktion mit einer realitätsnäheren Abbildung der Konstruktion (ohne Homogenisierung). Zur Optimierung des Rechenaufwandes unter Beibehaltung der im Laborversuch realisierten Schnittblockkonfiguration wurde die Schnittblockgröße proportional zum Schachtdurchmesser vergrößert (-> hier Modell Blindschacht mit D = 1,6 m; Schnittblockskalierung resultiert in Schnittblöcken von ca. 100 kg). Aktuell noch ungeklärt ist, ob unter Beibehaltung der im Laborversuch gewählten Schnittblockgröße ein Schacht von D = 8 m Durchmesser angesichts der dann vergleichsweise großen Element- und Knotenzahl rechnerisch noch in angemessenen Zeiten berechenbar ist (-> vgl. geplante Arbeiten).

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Abschluss der Arbeiten zur Herstellung von Salzschnittblöcken für einen Prüfkörper mit Fugenfüllung.
- AP3: Durchführung Wiederholungsversuch mit zunächst mechanischer und nachfolgend mechanisch-hydraulischer Belastung mit einem zweiten Prüfkörper aus Salzschnittblöcken ohne Fugenfüllung.
  - Durchführung eines Versuchs mit zunächst mechanischer und nachfolgend mechanisch-hydraulischer Belastung mit einem Prüfkörper mit Fugenfüllung.
- AP4: Weiterführung der rechnerischen Reanalysen des Technikumsversuchs mit aktuell priorisierter Vorgehensweise mit Salzgrus-Elementen für Fugensimulation:
  - Umstieg auf aktualisierte Software zur Realisierung von HM-Simulationen FLAC3D-TOUGH3 (-> Neuerungen gegenüber FLAC3D-THOUGH2: Aufhebung der Zonenanzahlgrenze von 100.000 und Optimierung der Rechenzeit).

Reanalyse und prognostische hydromechanisch gekoppelte Simulationen für die Salzschnittblockkonstruktion ohne Fugenfüllung mit einer Fugenbreite von 0,1 mm mit Anwendung von FLAC3D-TOUGH3.

Weiterführung der rechnerischen Reanalysen zur Untersuchung des hydraulisch-mechanischen Verhaltens der Salzschnittblockkonstruktion in einem Blindschacht.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Abstract: Düsterloh, U.; Lerche, S.; Zhao, J. (2021): Technikumsversuche zur Demonstration der Funktionalität von Abdichtungselementen aus Salzschnittblöcken, Interdisziplinäres Forschungssymposium für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung, BASE, Berlin, 10.-12. Nov. 2021

| Auftragnehmer:   |                           | Förderkennzeichen:      |
|--|---------------------------|-------------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   |                           | 02 E 11698              |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                         |
| Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-                                 | chemischer Ein            | wirkungen auf zementba- |
| sierte Dichtelemente (THYMECZ)   |                           |                         |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                         |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                       |                           |                         |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                     |
| 01.09.2018 bis 31.08.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                         |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                         |
| 2.142.267,00 EUR   | Dr. Meyer                 |                         |

Ziel des Vorhabens ist die systematische Untersuchung der thermischen, hydraulischen, mechanischen und chemischen Prozesse (THMC-Prozesse), die sich auf die Integrität eines Abdichtungselements bzw. des gesamten Abdichtsystems in einem Endlager auswirken können. Aufbauend auf den Erkenntnissen zahlreicher Pilotversuche an kombinierten Prüfkörpern aus Salzbeton und Steinsalz, die im Rahmen von LAVA-2 und LASA-EDZ gewonnen wurden, sollen, anhand systematisch aufgebauter Versuchsreihen, einzelne/gekoppelte THMC-Prozesse untersucht und die daraus resultierende Wirkung auf die Integrität der geotechnischen Barriere herausgearbeitet werden.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Bereitstellung von Material und Methoden

AP2: HC-Untersuchungen

AP3: HMC-Untersuchungen

AP4: THC-Versuche

AP5: TM-Versuche

AP6: THMC-Versuche

AP7: Modelltheoretische Untersuchungen

AP8: Dokumentation

AP9: Analyse von Salzprüfkörper aus der WIPP

# 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: In diesem Arbeitspaket erfolgt die Zusammenstellung bzw. Entwicklung geeigneter Untersuchungsmethoden basierend auf vorlaufenden FuE-Vorhaben.

Die Treffen des Arbeitskreises Betonkorrosion (AKB) im Jahr 2020/21 wurden aufgrund von Corona ausgesetzt.

AP2: An dem HC-Messstand werden seit fast zwei Jahr kombinierte Probekörper (Abdichtmaterial/Salz) für die Materialien A1 und M2 sowie monolithische Probekörper (MP)
für die Materialien M2, M2-ERAM, M4 und A1 untersucht. Die Versuche wurden mittlerweile in Langzeitkorrosionsexperimente überführt, um die langfristige Untersuchung
der Materialien im Kontakt zu salinaren Lösungen beobachten zu können. In dem zurückliegenden Berichtszeitraum konnte der Lösungsdurchbruch der ersten A1-Probe im

- Kontakt zu NaCl-Lösung nach 700 d beobachtet werden. In Analogie zu den THC-Versuchen wurde ein starker Anstieg der Permeabilität von 2 Größenordnungen beobachtet.
- AP3: Zurzeit werden in den Autoklaven kombinierten Probekörper des Sorelbeton A1 untersucht. Aufgrund der hohen Anfangspermeabilität wurden diese Proben zunächst bei anliegendem Manteldruck von 50/100 bar vorkompaktiert, um eine Ausgangspermeabilität von ca. 1·10<sup>-18</sup> m² zu erreichen. Mittlerweile ist das Material A1 seit 600 d im Kontakt zu den salinaren Lösungen. Es zeigte sich zunächst eine Erhöhung um ca. eine Größenordnung im Kontakt zu IP21-Lösung, mittlerweile hat die Permeabilität wieder den ursprünglichen Wert von ca. 1·10<sup>-18</sup> m² erreicht. Im Kontakt zu NaCl-Lösung ist eine Abnahme der Permeabilität von mehr als eine Größenordnung zu beobachten.
- AP4: Die Ergebnisse der ersten Untersuchungen an den monolithischen Probekörpern des A1 im Kontakt mit NaCl-Lösung sollten in dem zurückliegenden Zeitraum bestätigt werden, wiederum war ein Lösungsdurchbruch nach ca. 90 d zu beobachten. Die restlichen Untersuchungen werden entsprechend der Versuchsplanung weitergeführt.
- AP5: Die im AP5 vorgesehenen Versuche wurden erfolgreich abgeschlossen.
- AP6: Die Beschaffung der Komponenten des THMC-Messstandes konnte abgeschlossen werden und mit dem Aufbau der Anlage wurde begonnen.
- AP7: Das Modellverständnis der Korrosionsprozesse soll mit Hilfe der durchgeführten Experimente, im Besonderen auch der durchgeführten Langzeitversuche, vertieft werden. Mit Hilfe von Langzeitkorrosionsexperimenten soll zunächst der Chemismus der stattfindenden Reaktionen experimentell und anschließend modelltheoretisch mit Hilfe einer geeigneten Datenbasis (THEREDA) untersucht werden.
- AP8: Erstellung der Dokumente zur Qualitätssicherung der Arbeiten im Projekt sowie die Erstellung des Halbjahres- und Jahresberichtes.
- AP9: Die Prüfkörper konnten noch nicht zur Verfügung gestellt werden, da die Kernbohrungen in der WIPP Corona-bedingt nicht wie geplant durchgeführt werden konnten. Zu welchem Zeitpunkt die Kerne gebohrt und an die GRS gesandt werden können, ist derzeit nicht absehbar.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Im folgenden HJ wird der THMC-Messstand überprüft und in Betrieb genommen sowie Messungen an den vorgesehenen Systemen durchgeführt. Die Langzeitkorrosionsexperimente werden fortgesetzt.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:  |                           | Förderkennzeichen: |
|---|---------------------------|--------------------|
| Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer   | -Str. 2a,                 | 02 E 11748A        |
| 38678 Clausthal-Zellerfeld  |                           | 02 E 11/48A        |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                    |
| Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüs- |                           |                    |
| sigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand |                           |                    |
| Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt A       |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle          |                           |                    |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                                |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.01.2019 bis 30.06.2022   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                    |
| 1.727.898,00 EUR  | Prof. Dr. Lange           | efeld              |

Das übergeordnete Ziel dieses Vorhabens ist es, den Verschluss von hochradioaktiven Abfällen in einem Bergwerk sicher zu gestalten. Die Kenntnisse zur Verdichtung der Auflockerungszonen im Kontaktbereich zwischen Wirtsgestein und Dammbauwerk sind von Bedeutung, um eine sichere Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen im salinaren Milieu gewährleisten zu können.

Vorrausgegangen sind diesem Projekt die "Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung– Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden)" mit dem FKZ 02E11253 sowie der "Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches – Phase II (Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel) mit dem FKZ 02E11597. Diese Projekte lieferten das Basiswissen, auf welchem in diesem Projekt aufgebaut wird.

Im Rahmen dieses Projektes wird die In-situ-Testung des Konzeptes für eine gegenständliche Nachweisführung der strömungstechnischen Dichtwirkung eines Bauwerkes in der vierten Projektphase vorbereitet. Das Nachweiskonzept ist prinzipiell für verschiedene Wirtsgesteine geeignet. Entsprechend der Ausrichtung der Untersuchungen in den ersten beiden Projektphasen und dem Bezug zu den deutschen Endlagern im Salinargebirge werden die Untersuchungen in der dritten Projektphase ebenfalls auf Verschlussbauwerke im Salinargebirge ausgerichtet.

Folgende Untersuchungen sollen in diesem Projekt vor Ort durchgeführt und weitere Erkenntnisse gewonnen werden:

- geophysikalische Untersuchungen zur Beurteilung der differenzierten Vorgänge und Parameterverteilung im Kontaktbereich Dichtbaustoff/Gebirge
- Entwicklung und Testung ausgewählter Komponenten und Materialien eines In-situ-Versuches im halbtechnischen Maßstab -> u. a. Ringkammern, Bohrungsführung, Mehrfachpacker
- Auswahl, Parametrisierung und Vorgaben zur Qualitätssicherung für d. Einbau d. Dichtbaustoffes.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Kontaktbereich – Vertiefung Kenntnisstand Durch Laboruntersuchungen soll der Kontaktbereich zwischen Bauwerk und Gebirge genauer untersucht werden.

AP2: Materialuntersuchungen

In Abhängigkeit von den Randbedingungen, wie das geochemische Milieu oder der zu injizierende Porenraum, werden unterschiedliche Injektionsmittel auf Ihre Verwendbarkeit getestet.

AP3: Vorversuche zur Konzipierung der Versuchsinstallation Die Voruntersuchungen beinhalten die Konzipierung, den Bau und die Testung von Installationskomponenten und die vorbereitende Klärung von Detailfragen für die Installation, Testung und Prozessbeurteilung.

AP4: In-situ-Voruntersuchungen

Die Erkenntnisse aus den vorherigen Arbeitspaketen werden in diesem Arbeitspaket aufgegriffen und dienen als Grundlage für die Durchführung von Handhabungs- und vereinfachten Referenzversuchen an einem in situ errichteten Segment eines Dammbauwerkes.

AP5: Berichtslegung – Dokumentation, Interpretation, Schlussfolgerungen

# 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die In-situ-Permeabilitätsmessungen des Gebirges wiesen an der Kontur eine Durchlässigkeit von ca.  $6.5 * 10^{-17}$  m² bis  $8 * 10^{-22}$  m² auf. Ab einem Abstand von 1.8 m LU der Gebirgskontur wurde in dem Gebirge eine Permeabilität von  $1 * 10^{-22}$  m² gemessen. Die Porosität des Steinsalzes beträgt ca.  $0.022 \pm 0.018$ .

Die effektive Gaspermeabilität der verwendeten Al-Mörtel-Proben liegen zwischen  $1.2*10^{18}$  m\* und  $1.0*10^{19}$  m<sup>2</sup>.

- AP2: Als zusätzliches Injektionsmittel wurde die Al-Suspension basierend auf den genutzten Magnesiabaustoffen und Magnesiumchloridlösungen geprüft und als geeignet befunden.
- AP3: Um einer Sedimentation des Betons entgegenzuwirken und das Auftreten einer Überstandsflüssigkeit zu verhindern, wird Anhydrit als Bindemittel für den Mörtel verwendet. Insgesamt werden 4 Ma % dem angemischten Mörtel hinzugefügt. Durch die Verwendung von neuer Magnesia wurde aufgrund der Reinheit die Mörtelzusammensetzung angepasst.
- AP4: Die Installationsvorbereitungen in der Versuchsstrecke sind abgeschlossen. Nach der erfolgten Betonierung kann mit geophysikalischen Messmethoden die Änderungen der Permeabilität in den Kontaktbereichen durch die Injektion detektiert werden.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Errichtung des Dammes erfolgt Ende Juli 2021. Nachdem der Kontaktbereich mithilfe von Injektionen abgedichtet worden ist, sollen Probebohrungen in diesen Bereich gestoßen und untersucht werden.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:  |                           | Förderkennzeichen:        |
|---|---------------------------|---------------------------|
| Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr.                           |                           | 02 E 11748B               |
| 400, 01328 Dresden  |                           | 02 E 11/48B               |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                           |
| Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsn   | achweis für Vers          | schlussbauwerke und flüs- |
| sigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand |                           |                           |
| Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt B       |                           |                           |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle          |                           |                           |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                                |                           |                           |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra            | um:                       |
| 01.01.2019 bis 31.12.2021   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                           |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                           |
| 39.015,00 EUR   | Dr. Kulenkamp             | ff                        |

Das übergeordnete Ziel dieses Verbundvorhabens ist es, der Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen in Deutschland ein Stück näher zu kommen. Die Kenntnisse zur Verdichtung der Auflockerungszonen im Kontaktbereich zwischen Wirtgestein und Dammbauwerk sind elementar um eine sichere Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen im salinaren Milieu gewährleisten zu können.

Dieses Projekt baut auf die Ergebnisses zweier Projekte der TU Clausthal auf: "Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung– Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden)" (02E11253) sowie der "Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches- Phase II (Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel) (02E11597).

Im Rahmen dieses Projektes wird die In-situ-Testung des Konzeptes für eine gegenständliche Nachweisführung der strömungstechnischen Dichtwirkung eines Bauwerkes in der vierten Projektphase vorbereitet. Das Nachweiskonzept ist prinzipiell für verschiedene Wirtsgesteine geeignet. Entsprechend der Ausrichtung der Untersuchungen in den ersten beiden Projektphasen und dem Bezug zu den deutschen Endlagern im Salinargebirge werden die Untersuchungen in der dritten Projektphase ebenfalls auf Verschlussbauwerke im Salinargebirge ausgerichtet.

Folgende Untersuchungen sollen in diesem Projekt vor Ort durchgeführt und weitere Erkenntnisse gewonnen werden:

- geophysikalische Untersuchungen zur Beurteilung der differenzierten Vorgänge und Parameterverteilung im Kontaktbereich Dichtbaustoff/Gebirge,
- Entwicklung und Testung ausgewählter Komponenten und Materialien eines In-situ-Versuches im halbtechnischen Maßstab -> u. a. Ringkammern, Bohrungsführung, Mehrfachpacker,
- Auswahl, Parametrisierung und Vorgaben zur Qualitätssicherung für den Einbau des Dichtbaustoffes

Das Teilprojekt des HZDR fokussiert auf die Materialdurchlässigkeit als den entscheidenden Parameter. Aus dem Vergleich von Porenradienverteilungen aus 3D-bildgebenden Verfahren (µCT) und Hg-Porosimetrie werden robuste Verfahren und Modelle entwickelt, die eine quantitativ zuverlässige Bewertung der strömungswirksamen Porosität des Materials ermöglichen.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Kontaktbereich – Vertiefung Kenntnisstand

Durch Laboruntersuchungen soll der Kontaktbereich zwischen Bauwerk und Gebirge genauer untersucht werden.

AP2: Materialuntersuchungen

In Abhängigkeit von den Randbedingungen wie das geochemische Milieu, der zu injizierende Porenraum werden unterschiedliche Injektionsmittel auf Ihre Verwendbarkeit getestet werden.

AP3: Vorversuche zur Konzipierung der Versuchsinstallation

Die Voruntersuchungen beinhalten die Konzipierung, den Bau und die Testung von Installationskomponenten und die vorbereitende Klärung von Detailfragen für die Installation, Testung und Prozessbeurteilung.

AP4: In-situ-Voruntersuchungen

Die Erkenntnisse aus den vorherigen Arbeitspaketen werden in diesem Arbeitspaket aufgegriffen und dienen als Grundlage für die Durchführung von Handhabungs- und vereinfachten Referenzversuchen an einem in situ errichteten Segment eines Dammbauwerkes.

AP5: Berichtslegung – Dokumentation, Interpretation, Schlussfolgerungen

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Keine größeren Aktivitäten. Wartezeit auf neues Bauwerksmaterial. Reparatur/Wartung CT-Scanner.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Sobald Proben aus dem Bauwerksmaterial im Juli 2021 zur Verfügung stehen, werden sie mit Hilfe des bewährten Verfahrens untersucht.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:  |   | Förderkennzeichen: |
|---|---|--------------------|
| BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Pe  | BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine |                    |
| Vorhabensbezeichnung:   |   |                    |
| Weiterentwicklung der Konzepte der Transport- und Einlagerungstechnik von Endlagerbe- |   |                    |
| hältern (TREND)   |   |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle        |   |                    |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.2                              |   |                    |
| Laufzeit des Vorhabens: Berichtszeitraum:   |   |                    |
| 01.01.2019 bis 28.02.2021   | 01.01.2021 bis 28.02.2021                       |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:                                  |                    |
| 563.242,17 EUR  | Bertrams  |                    |

Ziel des Vorhabens ist es, die Konzepte der Transport- und Einlagerungstechnik für verschiedene Abfallgebinde in unterschiedlichen Endlagerkonzepten auf einen vergleichbaren Entwicklungsstand zu bringen. Im Ergebnis soll ein weitestgehend homogener Entwicklungs-stand der Transport- und Einlagerungstechnik über die verschiedenen Kombinationen von Einlagerungskonzepten und Wirtsgesteinen hinweg erreicht werden.

Die Planungen der existierenden und erprobten Technik für die Streckenlagerung von POL-LUX®-Behältern (F&E Programm DEAB) und die vertikale Bohrlochlagerung von Brennstabkokillen in Salz (F&E Vorhaben DENKMAL) sind hinsichtlich des Standes der Technik zu überprüfen und ggf. weiter zu entwickeln. Die bisherige Konzeptidee zur horizontalen Bohrlochlagerung aus dem F&E Vorhaben KOSINA soll deutlich weiterentwickelt werden, so dass wesentliche Maße und technische Daten der Technik zur Verfügung stehen. Im Bereich der direkten Endlagerung von Transport- und Lagerbehälter ist eine Weiterentwicklung durchzuführen.

- AP1: Grundlagen
- AP2: Einlagerungskonzept: Horizontale Kurzbohrlochlagerung von Transport- und Lagerbe-
- AP3: Einlagerungskonzept: Streckenlagerung
- AP4: Einlagerungskonzept: Vertikale Bohrlochlagerung
- AP5: Einlagerungskonzept: Horizontale Bohrlochlagerung
- AP6: Dokumentation und Abschlussbericht

Innerhalb des Berichtszeitraums wurden die verbleibenden Arbeiten zu den Arbeitspakten abgeschlossen. Insbesondere wurden noch Abbildungen und Animationen optimiert. Der Abschlussbericht wurde im Entwurf erstellt und für eine Freigabe und Veröffentlichung vorbereitet.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine, Vorhaben beendet.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:  |                           | Förderkennzeichen:      |  |
|---|---------------------------|-------------------------|--|
| Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben                                    | 1, 07743 Jena             | 02 E 11759A             |  |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                         |  |
| Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experi                                     | mente zur Bento           | nit Langzeit-Stabilität |  |
| und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), |                           |                         |  |
| Teilprojekt A   | Teilprojekt A             |                         |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle        |                           |                         |  |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                              |                           |                         |  |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra            | ım:                     |  |
| 01.05.2019 bis 30.04.2022   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                         |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                         |  |
| 375.308,00 EUR  | Prof. Dr. Schäfe          | er                      |  |

Hauptziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der Prozesse weiter zu vertiefen, die unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen die Integrität der Bentonitbarriere beeinträchtigen und zu einem kolloidgetragenen Radionuklid (RN)-Transport führen können. Dies umfasst die grundlegenden Mechanismen der Bentoniterosion und Kolloidbildung am Übergang des Bentonit-Versatzes/-Puffers zum Kristallingestein, die RN-Speziation, insbesondere die Wechselwirkungen zwischen RNs und Kolloiden sowie die Wechselwirkungen von gelösten RN und/oder Kolloiden mit den Gesteinsoberflächen. Die geplanten Arbeiten bauen auf den in Kollorado-e2 erzielten Erkenntnissen auf. Das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel unter Anwendung von spektroskopischen und mikroskopischen Methoden der Partner FSU und KIT-INE soll dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen RN-Transports zu erreichen. Es soll die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse von GRS verwendeten Codes CLAYPOS, COFRAME und d³f++ ermittelt werden. Diese Codes sowie von KIT-INE und FSU genutzte gekoppelte reaktive Transportmodelle werden zur Beschreibung der Feldexperimente weiterentwickelt, angewandt und damit weiter qualifiziert.

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT, FSU)
- AP1.1: Radionuklidtransport in kompaktiertem Bentonit
- AP1.2: Integrität der Bentonitbarriere
- AP1.3: Kolloidgetragener Radionuklidtransport
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS, KIT, FSU)
- AP2.1: Benchmarkrechnungen zu thermodynamischen Daten (GRS, KIT, FSU)
- AP2.2: Simulationsrechnungen für das CFM Experiment LIT und Mock-Up Tests (GRS)
- AP2.3: Simulationsrechnungen für bisherige und weitere CFM Feldexperimente (GRS)
- AP2.4: Modellrechnungen/Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS, KIT, FSU)

<u>AP1:</u> Zwei Sets von vier Erosionsexperimenten mit jeweils unterschiedlichen Probentabletten (1x MX-80 Roh-Bentonit; 3x aufgereinigter Na-Montmorillonit (Na-Mnt) mit einer gezielten Zugabe von akzessorischem Quarzmehl (0, 10 & 20 Gew. %) und einer Trockendichte von  $1.8 \pm 0.05$  g/cm³) wurden erfolgreich durchgeführt. Die Kontaktlösungen wurden durch kontinuierliche Probenahme aufgefangen und standen zur weiteren chemischen und Kolloid- Analytik zur Verfügung.

Das erste Experimentset wurde über einen Zeitraum von 56 Tagen mit regulärem Grimsel Grundwasser (GGW) durchgeführt. Dabei wurde ein maximaler Druck von 2,18 MPa für die 100 % aufgereinigte MX-80 Na-Mnt. Probe gemessen. Ein räumlich aufgelöster maximaler Kontaktdruck (Gesamtdruck/Kontaktfläche) konnte für 100 % Na-Mnt mit 0,96 MPa, für 90 % Na-Mnt mit 0,74 MPa und für 80 % Na-Mnt-Probe mit 0,49 MPa bestimmt werden. Durch das transparente Design der Messzelle ist das zeitliche Quellen in die 1 mm Apertur parallel zu den ortsaufgelösten Druckdaten kontinuierlich aufgezeichnet werden. Es zeigte sich eine nahezu quantitative Auswaschung des Materials der Na-Mnt- Proben. Veränderungen der Kontaktlösung ließen sich über die nasschemischen Analysen beobachten und werden momentan ausgewertet. Auch ließ sich ein starker Anstieg der Kolloidkonzentration zum Zeitpunkt der Erosion beobachten ohne signifikante Veränderung der Partikelgrößenverteilung. Das zweite Experimentset lief 119 Tagen. Kontaktwasser war hier GGW mit einer Zugabe von Ca auf konstant 2 mmol/l. Vergleichsweise wurde hier ein etwas geringerer maximaler Druck von 1,93 MPa für 100 % Na-Mnt bestimmt. Ein räumlich aufgelöster maximaler Kontaktdruck konnte für 100 % Na-Mnt mit 0,93 MPa, für 90 % Na-Mnt mit 0,59 MPa und für 80 % Na-Mnt mit 0,53 MPa gemessen werden. Im Vergleich zum ersten Na-Mnt Experiment zeigte sich eine in etwa vergleichbare Ausdehnung in den Quellraum (r ~ 25 mm). Lediglich die Rohmaterial-Probe zeigte im 1. Experiment eine deutlich weitreichendere Ausdehnung (r = 35 mm) im Vergleich zum 2. Experiment (r = 17 mm). Die Erhöhung der Ca-Konzentration im GGW über den kritischen Wert der CCC (Seher et al., 2020) trug wesentlich zur Stabilisierung des Systems bei. Nanopartikel-Tracking-Analyse (NTA)-Messungen zeigten in den Na-Mnt Versuchen mit 2 mmol/L Ca leicht schwankende Kolloidkonzentrationen um 1.0E+07 ± 2.5E+06 Partikel pro ml sowie eine mittlere Partikelgröße von  $158.2 \pm 12.8$  nm.

Fortgesetzt wurde die kontinuierliche Probennahme im i-BET Experiment im Rahmen des CFM-Projekts zum Erosionsverhalten von Bara Kade (MX-80) Bentonit und Durchführung sowie Auswertung nasschemischer (ICP-MS, IC) und Kolloidanalysen speziell mittels Nanopartikel-Tracking-Analyse (NTA). Die geplante Probennahme-Strategie des LIT-Bohrkernes verzögerte sich durch den Bau einer geeigneten Säge und dem Zugang zum Felslabor. Ein erstes geschnittenes Segment des Bohrkerns ist nach Dosisleistungsbestimmung durch PSI an das KIT-INE versandt worden.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

<u>AP1:</u> Quantitative Charakterisierung der Erosion des im i-BET-Experiments eingesetzten MX-80 Montmorillonits (speziell zur gravimetrischen Erosion). Fortführung der Labor- Erosionsexperimente zum Einfluss von akzessorischen Gemengteilen. Teil-Substitution des Quarzmehls durch Ca-Träger unterschiedlicher Löslichkeit sowie Durchführung weiterer Erosionsexperimente mit Fokus auf in-situ und post-mortem Analysen des Quellverhaltens, des partiell aufgelösten Quelldrucks unter Verwendung verschiedener Tekscan<sup>TM</sup>-Drucksensor-Systeme, der NTA sowie weiterer nasschemischer Analysen. Nach Erhalt von Sub-Samples des geschnittenen LIT-Experiment Kerns (Febex-Bentonit) Untersuchung der Expansionslänge mittels XRM sowie eine mineralogische Charakterisierung der Ton-Gelschicht und dessen mögliche Transformation mittels LA-ICP-MS.

<u>AP2:</u> Die Einreichung zweier Manuskripte der thermodynamischen Simulationsrechnungen (national & international) verzögerte sich weiterhin und ist nun für die zweite Jahreshälfte 2021 geplant. <u>AP3:</u> Zur Koordination wurden mehrere bilaterale online Besprechungen durchgeführt.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Huber, F.M., Leone, D., Trumm, M., Moreno, L.R., Neretnieks, I., Wenka, A., and Schäfer, T. (2021): Impact of rock fracture geometry on geotechnical barrier integrity – A numerical study. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences 142, 104742

| Zuwendungsempfänger:  |                         | Förderkennzeichen:      |  |
|---|-------------------------|-------------------------|--|
| Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für   |                         | 02 E 11759B             |  |
| Fechnologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eg- |                         | 02 E 11/59D             |  |
| genstein-Leopoldshafen                                      |                         |                         |  |
| Vorhabensbezeichnung:                                       |                         |                         |  |
| Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-E                | Experimente zur Bento   | nit Langzeit-Stabilität |  |
| und der Radionuklidmobilität an der Grenzfl                 | äche Bentonit - Kristal | llin (KOLLORADO-e3),    |  |
| Teilprojekt B   |                         |                         |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: For                        | schung zur Entsorgu     | ng radioaktiver Abfälle |  |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonze                  | pte, Feld: 2.3          |                         |  |
| Laufzeit des Vorhabens:                                     | Berichtszeitra          | um:                     |  |
| 01.05.2019 bis 30.04.2022                                   | 01.01.2021 bis          | 30.06.2021              |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:                                 | Projektleiter:          | Projektleiter:          |  |
| 371.183.00 EUR  | Dr. Marquardt           | Dr. Marquardt           |  |

Hauptziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der Prozesse weiter zu vertiefen, die unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen die Integrität der Bentonitbarriere beeinträchtigen und zu einem kolloidgetragenen Radionuklid (RN)-Transport führen können. Dies umfasst die grundlegenden Mechanismen der Bentoniterosion und Kolloidbildung am Übergang des Bentonit-Versatzes/Puffers zum Kristallingestein, die RN-Speziation, insbesondere die Wechselwirkungen zwischen RNs und Kolloiden sowie die Wechselwirkungen von gelösten RN und/oder Kolloiden mit den Gesteinsoberflächen. Die geplanten Arbeiten bauen auf den in Kollorado-e2 erzielten Erkenntnissen auf.

Das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel unter Anwendung von spektroskopischen und mikroskopischen Methoden der Partner FSU und KIT-INE soll dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen RN-Transports zu erreichen. Es soll die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse von GRS verwendeten Codes CLAYPOS, COFRAME und d³f++ ermittelt werden. Diese Codes sowie von KIT-INE und FSU genutzte gekoppelte reaktive Transportmodelle werden zur Beschreibung der Feldexperimente weiterentwickelt, angewandt und damit weiter qualifiziert.

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT, FSU)
- AP1.1: Radionuklidtransport in kompaktiertem Bentonit
- AP1.2: Integrität der Bentonitbarriere
- AP1.3: Kolloidgetragener Radionuklidtransport
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS, KIT, FSU)
- AP2.1: Benchmarkrechnungen zu thermodynamischen Daten (GRS, KIT, FSU)
- AP2.2: Simulationsrechnungen für das CFM Experiment LIT und Mock-Up Tests (GRS)
- AP2.3: Simulationsrechnungen für bisherige und weitere CFM Feldexperimente (GRS)
- AP2.4: Modellrechnungen/Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS, KIT, FSU)

LIT-Mock-up-Experimente und In-situ-LIT "post-mortem" Analysen

Die Plexiglasbox des aktiven Mock-up-Tests, der die Ampullen mit dem Radionuklid-Tracer-Cocktail enthielt, wurde geöffnet. Der Bentonit-Ring und das Bentonit-Gel wurden als zwei fast gleich große Proben erhalten, die auf der oberen und der unteren Platte der Plexiglasbox haften. Zwei der Ampullen blieben intakt während die anderen beiden aufgrund des Druckanstiegs innerhalb des Experiments gebrochen waren. An der Oberfläche der einen Hälfte des Rings wurde eine Autoradiographie durchgeführt, um die Aktivität von <sup>241</sup>Am und <sup>137</sup>Cs zu detektieren. Es wurden zwei verschiedene Diffusionsprofile beobachtet: i) im Fall der intakten Ampulle sind die Radionuklide immer noch größtenteils in der Ampulle enthalten und durch Diffusion im Millimeterbereich um das Fläschchen herum verteilt; ii) bei der zerbrochenen Ampulle diffundieren die Radionuklide im Zentimeterbereich weiter von der Quelle entfernt. Mit der ersten In-situ-LIT-Probe wurde das Probenahmeverfahren zur Analyse der aktiven LIT-Proben getestet. Der Bentonit-Ring wurde mit einer oszillierenden Multi-Tool-Säge aus dem Granodiorit herausgeschnitten. Anschließend wurden feine Pulverproben aus dem Bentonit-Ring gebohrt. Diese Bentonit-Proben wurden mittels SEM-EDX und XRD charakterisiert, um Informationen über die mineralogische Zusammensetzung zu erhalten. Einige Minerale, die ursprünglich im Bentonit vorhanden waren (z. B. Gips), wurden nicht nachgewiesen. Dies deutet auf eine Auflösung dieser Minerale hin, während sich gleichzeitig Sekundärphasen im Ring bildeten (z. B. Pyrit). Anschließend wurden die Bentonit-Proben mit Flusssäure und Königswasser aufgeschlossen und mittels Sektorfeld (SF) ICP-MS analysiert, um weitere Informationen über ihre elementare Zusammensetzung zu erhalten. Die elementare Zusammensetzung der LIT-Proben wurde mit dem ursprünglichen Bentonit-Material verglichen. Die (SF) ICP-MS Ergebnisse zeigen außerdem, dass in diesen Proben keine im LIT-Experiment verwendeten Radionuklid-Tracer nachgewiesen werden konnten.

Analyse von Grimsel-Grundwasserproben mittels AMS, um den Durchbruch der Radionuklid-Tracer <sup>233</sup>U, <sup>237</sup>Np, <sup>242</sup>Pu, <sup>241</sup>Am und <sup>99</sup>Tc im In-situ-LIT Experiment zu überprüfen

Aus den Ergebnissen der Analysen der Grundwasserproben aus dem In-situ-LIT-Experiment wurde eine Freisetzung von ca. 8,5 × 10<sup>-3</sup> % des <sup>99</sup>Tc innerhalb des experimentellen Zeitraums von 4,5 Jahren abgeleitet. Zur Interpretation der Ergebnisse bezüglich der Actiniden laufen weitere Untersuchungen, insbesondere über die mögliche Überschätzung des Scherzonenhintergrunds von vergangenen, in-situ durchgeführten Radionuklid-Tracer-Experimenten.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Von dem Mock-up-Test als auch vom In-situ-LIT werden dünne Bentonitschichten mittels Peeling abgetragen, um Diffusionsprofile der Radionuklide im Bentonit zu erhalten. Nach der Desorption der Radionuklide mit konzentrierter Salpetersäure, wird die Konzentration der Radionuklid-Tracer <sup>233</sup>U, <sup>237</sup>Np, <sup>242</sup>Pu, <sup>241</sup>Am und <sup>99</sup>Tc mittels (SF) ICP-MS für jede Schicht bestimmt. Eine erste Testphase zur Messung der Proben mittels LA-ICP-MS sind geplant.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Entsprechende Publikationen sind in Vorbereitung.

| Auftragnehmer:  |                | Förderkennzeichen: |
|---|----------------|--------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln  |                | 02 E 11759C        |
| Vorhabensbezeichnung:   |                |                    |
| Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt C |                |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle  |                |                    |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3  |                |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra | um:                |
| 01.05.2019 bis 30.04.2022   | 01.01.2021 bis | 30.06.2021         |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter: |                    |
| 291.340,00 EUR  | Dr. Noseck     |                    |

Hauptziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der Prozesse weiter zu vertiefen, die unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen die Integrität der Bentonitbarriere beeinträchtigen und zu einem kolloidgetragenen Radionuklid (RN)-Transport führen können. Dies umfasst die grundlegenden Mechanismen der Bentoniterosion und Kolloidbildung am Übergang des Bentonit- Versatzes/Puffers zum Kristallingestein, die RN-Speziation, insbesondere die Wechselwirkungen zwischen RNs und Kolloiden sowie die Wechselwirkungen von gelösten RN und/oder Kolloiden mit den Gesteinsoberflächen. Die geplanten Arbeiten bauen auf den in Kollorado-e2 erzielten Erkenntnissen auf. Das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel unter Anwendung von spektroskopischen und mikroskopischen Methoden der Partner FSU und KIT-INE soll dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen RN-Transports zu erreichen. Es soll die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse von GRS verwendeten Codes CLAYPOS, COFRAME und d<sup>3</sup>f++ ermittelt werden. Diese Codes sowie von KIT-INE und FSU genutzte gekoppelte reaktive Transportmodelle werden zur Beschreibung der Feldexperimente weiterentwickelt, angewandt und damit weiter qualifiziert.

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT, FSU)
- AP1.1: Radionuklidtransport in kompaktiertem Bentonit
- AP1.2: Integrität der Bentonitbarriere
- AP1.3: Kolloidgetragener Radionuklidtransport
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS, KIT, FSU)
- AP2.1: Benchmarkrechnungen zu thermodynamischen Daten (GRS, KIT, FSU)
- AP2.2: Simulationsrechnungen für das CFM Experiment LIT und Mock-Up Tests (GRS)
- AP2.3: Simulationsrechnungen für bisherige und weitere CFM Feldexperimente (GRS)
- AP2.4: Modellrechnungen/Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS, KIT, FSU)

AP2: Abstimmung des Entwurfs zu den thermodynamischen Benchmarkrechnungen mit den Partnern FSU, GRS, KIT-INE, UJV, JAERI, RWM, CIEMAT and KAERI zur Veröffentlichung in Applied Geochemistry.

Fertigstellung der Masterarbeit zu Strömungs- und Transportrechnungen mit dem Rechenprogramm PHAST zu den gekoppelten Prozessen im Nahbereich des LIT-Experiments.

Fertigstellung des Transportmodells für den Code COFRAME und Durchführung von Transportrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport für ein potenzielles deutsches Endlagersystem unter Verwendung der im Vorhaben RESUS berechneten Radionuklidfreisetzungen aus dem Nahbereich.

Diskussion der Ergebnisse zu den Modellrechnungen zu Transport und Geochemie im Nahfeld des LIT und korrespondierender Laborexperimente bei FSU. Planung der Simulationsrechnungen für die Laborversuche und Erstellung des Modells.

AP3: Teilnahme am virtuellen Kollorado-e<sup>3</sup> Meeting mit Vorstellung des aktuellen Stands zu den Strömungs- und Transportrechnungen im Nahbereich des LIT-Experiments. Diskussion des derzeitigen Stands der Analyse und Auswertung des überbohrten LIT-Experiments. Durchführung bilateraler Projekttreffen mit FSU.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Modifikation der Geometrie für die Vorhersagerechnungen zur Radionuklid-Diffusion im Bentonit auf Basis der CT-Ergebnisse zur Lage der Kluft. Durchführung weiterer Rechnungen für die Mock-up-Experimente.

Weiterführung der Transportrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport für ein potenzielles deutsches Endlagersystem. Durchführung von Parametervariationen zur Ermittlung deren Einflusses auf die Radionuklidströme aus der Granitformation.

Durchführung von Modellrechnungen mit PHAST zu den am FSU durchgeführten Ionenaustauschexperimenten mit vorbehandelten Montmorilloniten aus MX-80 und FE-BEX-Bentonit und Mischungen mit Quarz und Ca-haltigen Mineralen (Gips oder Calcit). Ermittlung des Einflusses von Ionenaustauschprozessen und der Gipsauflösung auf die erwarteten Ionenkonzentrationen in Lösung und Vergleich mit den experimentell bestimmten Werten.

AP3: Durchführung weiterer bilateraler Arbeitsgespräche und eines Kollorado-e3 Projekttreffens zum Austausch von Ergebnissen und Koordination der Arbeiten mit den Partnern von FSU und KIT-INE. Teilnahme am CFM Partner Meeting.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Chemnitius: Simulationsrechnungen zu geochemischen und Transport-Prozessen im Nahbereich einer Bentonitbarriere in einem Feldexperiment im Felslabor Grimsel, Schweiz. Masterarbeit, Georg-August-Universität Göttingen, 17.01.2021

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen:      |
|--|---------------------------|-------------------------|
| Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6,                  |                           | 02 E 11769A             |
| 09599 Freiberg   |                           | 02 E 11709A             |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                         |
| Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenver                                | schlüsse für HA           | W-Endlager im Steinsalz |
| (MgO-S3), Teilprojekt A  |                           |                         |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                         |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                       |                           |                         |
| Laufzeit des Vorhabens: Berichtszeitraum:                                      |                           |                         |
| 01.05.2019 bis 31.03.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                         |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                         |
| 1.518.723,00 EUR   | Dr. Gruner                |                         |

Der MgO-Beton D4 ist in zukünftigen HAW-Endlagern als Widerlagermaterial mit Abdichtfunktion für Schachtverschlüsse (in Ortbeton) und für Streckenverschlüsse (in Spritzbeton) sowohl im Steinsalz als auch im Anhydrit potentiell einsetzbar. Das Vorhaben MgO-S3 schafft wissenschaftliche und technische Voraussetzungen für die Konzeption und den Bau von Streckenverschlussbauwerken aus MgO-Spitzbeton, die für eine genehmigungsfähige Errichtung zukünftiger Streckenverschlussbauwerke aus MgO-Spitzbeton in zukünftigen HAW-Endlagern im Steinsalz genutzt werden können. Dazu soll die Datenbasis für MgO-Spritzbetonbauwerke im Steinsalz vervollständigt werden.

Die Bearbeitung des Vorhabens erfolgt gemeinsam mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) als Verbundpartner und mit der Bundesanstalt für Materialforschung und - prüfung (BAM) als Partner auf Basis einer Zusammenarbeitserklärung.

- AP1: Selektiver Rückbau des Funktionsbauwerkes GV2.
- AP2: Untersuchungen zur möglichen Variation der Spritzbetonrezeptur im Hinblick auf die technologische Verarbeitbarkeit.
- AP3: Laboruntersuchungen zur Vervollständigung der Datenbasis für MgO-Spritzbeton.
- AP4: Synthese/Wissenschaftliches Programm für ein In-situ-Verschlussbauwerk aus MgO-Spritzbeton im Steinsalz.

- AP1: In der radialen Bohrung B46 wurde integral eine effektive Gaspermeabilität von 5 \* 10<sup>-20</sup> m² gemessen. In der radialen Bohrung B45 betrug die integral gemessene effektive Gaspermeabilität 1,7 \* 10<sup>-17</sup> m². Nach abschnittsweisen Messungen wurde der Bereich zwischen 1,0 m und 1,4 m als höher permeabler Abschnitt mit einer Permeabilität von ca. 2 \* 10<sup>-16</sup> m² identifiziert. Die Messungen werden mit Lösung fortgesetzt.
- AP2: Im halbtechnischen Spritzversuch SBV6 wurde in 2 Teilversuchen die Robustheit der Rezeptur mit Salzzuschlag untersucht. Im Versuch SBV7 wurden in 2 Teilversuchen weitere Zuschläge mit einem quarzdominerten Gemisch aus 82 % Quarzsand und -kies (0,4 8 mm) und 18 % Salz (0 0,4 mm) und mit einem salzdominerten Zuschlag aus 82 % Salz (0 4 mm) und 18 % Quarzkies (4 8 mm) getestet und verglichen. Erstmalig wurden Pulsationsfrequenzen im Spritzstrahl gemessen.
- AP3: Durch das Abbinden der Spritzbetonrezeptur entsteht zwangsläufig eine Mindestporosität. Sie beträgt 2,0 % für die GV2-Rezeptur mit Quarzzuschlag und 2,5 % für die Rezeptur mit Salzzuschlag. Die tatsächliche Porosität liegt über diesen Werten. Die Proben aus dem In-situ-Spritzversuch GSBV1 (GV2-Rezeptur) haben parallel zu den Betonierabschnittsgrenzen eine Gaspermeabilität zwischen 10<sup>-19</sup> m² und 10<sup>-17</sup> m². Für die Proben aus dem halbtechnischen Spritzversuch SBV5A (Salzzuschlag) wurde eine effektive Gaspermeabilität um 10<sup>-18</sup> m² gemessen.
- AP4: Ein entscheidender Punkt für einen homogenen Spritzbeton ist ein gleichmäßiger Massestrom aus der Spritzdüse. Da die Rieselfähigkeit des Trockengemisches mit Salzzuschlag schlechter ist als die Rieselfähigkeit des Trockengemisches mit Quarzzuschlag, müssen für die Rezepturen mit Salzzuschlag weitere Untersuchungen und technische Anpassungen durchgeführt werden.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Die In-situ-Lösungspermeabilität in radial gestoßenen Bohrungen B45 im GV2 wird integral über die Länge von 0,4 m bis 2,36 m mit gesättigter NaCl-Lösung mit 2 mol MgCl<sub>2</sub>/kg H<sub>2</sub>O (endlagerrelevante Zutrittslösung) über einen längeren Zeitraum bis Dezember 2021 gemessen.
- AP2: Der In-situ-Spritzversuch GSBV4 wird durchgeführt.
- AP3: Die Festigkeiten der Proben aus den Versuchen SBV6, SBV7 und GSBV4 sollen ausgewertet werden.
- AP4: Bericht zu AP1.
  - Die Modellgeometrie für die thermische Modellierung zur Bestimmung der optimalen Schichtmächtigkeit wird abgestimmt, wobei als Modell ein MgO-Spritzbeton-Streckenverschlusses mit Instrumentierung zugrunde gelegt wird.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen:      |
|--|---------------------------|-------------------------|
| Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr.                  |                           | 02 E 11769B             |
| 400, 01328 Dresden   |                           | 02 E 11707B             |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                         |
| Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenver                                | schlüsse für HA           | W-Endlager im Steinsalz |
| (MgO-S3), Teilprojekt B  |                           |                         |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                         |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                       |                           |                         |
| Laufzeit des Vorhabens: Berichtszeitraum:                                      |                           |                         |
| 01.05.2019 bis 31.07.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                         |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                         |
| 168.309,00 EUR   | Dr. Kulenkamp             | ff                      |

Der MgO-Beton D4 ist in zukünftigen HAW-Endlagern als Widerlagermaterial mit Abdichtfunktion für Schachtverschlüsse (in Ortbeton) und für Streckenverschlüsse (in Spritzbeton) sowohl im Steinsalz als auch im Anhydrit potentiell einsetzbar. Das Vorhaben MgO-S3 schafft wissenschaftliche und technische Voraussetzungen für die Konzeption und den Bau von Streckenverschlussbauwerken aus MgO-Spitzbeton, die für eine genehmigungsfähige Errichtung zukünftiger Streckenverschlussbauwerke aus MgO-Spitzbeton in zukünftigen HAW-Endlagern im Steinsalz genutzt werden können. Dazu soll die Datenbasis für MgO-Spritzbetonbauwerke im Steinsalz vervollständigt werden.

Die Bearbeitung des Vorhabens erfolgt gemeinsam mit der TU Bergakademie Freiberg (TU-BAF) als Koordinator und mit der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) als Partner auf Basis einer Zusammenarbeitserklärung.

Das Teilprojekt des HZDR soll Fragen klären, die mit der Parametrisierung der Durchlässigkeit des prinzipiell inhomogenen Materials verbunden sind.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Selektiver Rückbau des Funktionsbauwerkes GV2.
- AP2: Untersuchungen zur möglichen Variation der Spritzbetonrezeptur im Hinblick auf die technologische Verarbeitbarkeit.
- AP3: Laboruntersuchungen zur Vervollständigung der Datenbasis für MgO-Spritzbeton.
- AP4: Synthese/Wissenschaftliches Programm für ein In-situ-Verschlussbauwerk aus MgO-Spritzbeton im Steinsalz.

Im Teilprojekt des HZDR werden im Rahmen der AP1 und 3 Transportuntersuchungen im Labor in Langzeit-Injektionsexperimenten mit Erfassung durch Positronen-Emissions-Tomographie (PET) und strukturelle Untersuchungen mit μCT vorgenommen.

AP1/3: Abschluss und Auswertung des PET/CT-Demonstrationsversuchs. Vorbereitung von 5 weiteren Proben für PET-Injektionsexperimente mit [<sup>22</sup>Na]NaCl-MgO-Lösung.

AP2: Keine eigenen Arbeiten im Teilprojekt.

AP3: Noch keine Arbeiten

AP4: Noch keine Arbeiten

# 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1/3: Fortsetzung PET-Injektionsexperimente an vorbereiteten Proben gemäß Absprache mit Partnern.

AP2: Keine eigenen Arbeiten im Teilprojekt.

AP3: Noch keine Arbeiten.

AP4: Noch keine Arbeiten.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Unter                          |                           | 02 E 11779         |
| den Eichen 87, 12205 Berlin  |                           | 02 E 11779         |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |
| MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz, Qualitätssiche- |                           |                    |
| rung mit Ultraschall (MgO-S3)  |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle         |                           |                    |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                               |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:         |                    |
| 01.05.2019 bis 31.10.2021  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 31.864,46 EUR  | Dr. Niederleithi          | inger              |

Dieses Vorhaben wird in Nachfolge des Vorhabens "MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl<sub>2</sub>-Lösung (MgO-SEAL)" (Förderkennzeichen: 02E11435, 01.10.2015 - 30.04.2019) und im Verbund mit "Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt A" (Förderkennzeichen: 02E11769A) durchgeführt.

Das Verbundvorhaben soll belegen, dass beim Angriff von MgCl<sub>2</sub>-haltiger gesättigter NaCl-Lösung auf dem MgO-Spritzbeton, die Phasenumwandlung der 5-1-8-Phase in die thermodynamisch stabile 3-1-8-Phase zu einer Reduzierung der Permeabilität führt. Dazu sollen Proben aus dem MgO-Spritzbeton untersucht werden, die ausreichend lange unter Einwirkung der Lösung standen. Diese Proben sollen sowohl aus den Langzeitbohrlochversuchen im MgO-Spritzbetonbauwerk GV2 als auch durch dessen partiellen Rückbau gewonnen werden.

Das hier beschriebene Vorhaben umfasst im Wesentlichen Ultraschalluntersuchungen am Bauwerk und an Proben, deren Auswertung sowie Empfehlungen für das weitere Vorgehen und zukünftige Qualitätssicherung.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die BAM hat Anteile in folgenden Arbeitspaketen des Verbundprojekts

AP1: Selektiver Rückbau des Funktionsbauwerkes GV2

AP1.1: Aufnahme des Ist-Zustandes des MgO-Spritzbetons

AP3: Laboruntersuchungen zur Vervollständigung der Datenbasis für MgO-Spritzbeton

AP3.7: Materialcharakterisierung durch US-Anwendungen

AP4: Synthese/Wissenschaftliches Programm für ein In-situ-Verschlussbauwerk aus MgO-Spritzbeton im Steinsalz

AP4.3: Vorschlag für die begleitende Qualitätssicherung bzw. -dokumentation

Der MgO-Spritzbeton soll durch Ultraschall-Messungen mit folgenden Zielen charakterisiert werden:

- Bestimmung von Ultraschall-Materialparametern
- Identifikation von Fehlstellen
- Ableitung von möglichen Parametern für eine Qualitätsüberwachung

Im vorherigen Berichtszeitraum (2. Hj. 2020) wurden Ultraschall-Messungen am 26.11.2020 auf eine ungefähr 0,5 m x 1 m Messfläche des dritten Spritzbetonversuch-Baukörpers durchgeführt. Das Ziel dieser Messungen war es, die Machbarkeit und Genauigkeit von Ultraschall-Messverfahren mit dem MIRA-System zum Zweck der Qualitätssicherung von Spritzbetonbauwerken zu testen beziehungsweise zu verifizieren. Diese Messungen wurden im Nachgang 2020/2021 ausgewertet. Erste Ergebnisse wurden den Projektpartnern im Januar übermittelt. Im Folgenden führten wir eine detailliertere Analyse durch, was im April 2021 zu einem aktualisierten Ergebnisbericht führte, der mit den Projektpartnern diskutiert wurde.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

Ein weiterer detaillierter Abgleich zwischen den Ergebnissen der LAUS-Messungen am GV2 (Messungen von Juni 2020) mit den Bohrergebnissen wird aktuell erneut auf neu diskutierte Bohrergebnisse hin untersucht, um die Anwendbarkeit der Ultraschallmethode zur Qualitätssicherung abschätzen zu können. Diese Untersuchungen werden im zweiten Halbjahr 2021 zum Abschluss gebracht und die Ergebnisberichte diesbezüglich aktualisiert.

Im 3. Quartal 2021 ist ein weiterer, letzter Messeinsatz mit Ultraschall-Messungen in der Grube Teutschenthal an dem neuen Spritzbeton-Messfeld Großversuch GV4 geplant. Die Fertigstellung des GV4 ist für September 2021 geplant. Im Anschluss an die Messung erfolgten die Auswertung und die Interpretation der Messdaten.

Im 4. Quartal 2021 und 1. Quartal 2021 werden die Ergebnisse abschließend bewertet und mit den Bohrergebnissen der Partner final diskutiert und abgeglichen. Vorschläge für die Qualitätssicherung bzw. –dokumentation durch Ultraschalluntersuchungen werden auf Basis dieser Informationen vorbereitet und im finalen Ergebnisbericht zusammengefasst.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Effner, U., Mielentz, F., Niederleithinger, E., Friedrich, C., Mauke, R., & Mayer, K. (2021): Testing repository engineered barrier systems for cracks - a challenge. Materialwissenschaft und Werkstofftechnik, 52(1), 19-31, doi:10.1002/mawe.202000118

| Zuwendungsempfänger:  |                           | Förderkennzeichen: |
|---|---------------------------|--------------------|
| Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserst                                     | tr. 12, 76131             | 02 E 11799A        |
| Karlsruhe   |                           | 02 E 11733A        |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                    |
| Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Haupt- |                           |                    |
| projekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A  |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle          |                           |                    |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                                |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitraum:         |                    |
| 01.07.2019 bis 30.06.2023   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                    |
| 2.709.003,00 EUR  | Dr. Emmerich              |                    |

Im Sandwich-Hauptprojekt wird im Felslabor Mont Terri (CH) ein großmaßstäbliches In-situ-Experiment zu einem vertikalen hydraulischen Verschlusssystem nach dem Sandwich-Prinzip umgesetzt. Die umfangreiche Vorplanung dazu wurde im Sandwich-Vorprojekt (02 E 11587A, 02 E 11587B) durchgeführt. Ebenso wie das Vorprojekt ist Sandwich-HP ein Verbundprojekt von GRS und KIT mit Beteiligung der internationalen Partner BGR, Swisstopo, Enresa, NWMO, RWM und ENSI. Die Projektleitung liegt bei der GRS.

Das von KIT entwickelte Sandwich-System besteht aus Wechsellagen von Bentonit-Dichtsegmenten (DS) und hydraulisch leitenden Potentialausgleichsschichten (Äquipotenzialsegmente – ES). Im Sandwich-HP werden solche Dichtsystem in zwei vertikalen Experimentalschächten von 1.2 m Durchmesser und 12 m bzw. 10 m Tiefe eingebaut. Die Dichtsysteme werden über Druckkammern im Schachttiefsten mit synthetischem Opalinuston-Porenwasser aufgesättigt, das jeweils über geneigte Zuleitungsbohrlöcher zugeführt wird. Die Schächte und das umgebende Gebirge werden zur Überwachung des Gesamtsystems intensiv instrumentiert. Die Versuchsziele umfassen die Demonstration der Einbautechnik, die Untersuchung des Aufsättigungsprozesses, die Qualifizierung der Mess- und Überwachungstechnik, die Bewertung der Wirksamkeit des Sandwich-Verschlusssystems.

- AP1: Finalisierung Testplan
- AP2: Instrumentierung Opalinuston und Probennahme Opalinuston
- AP3: Erstellung Experimentalschächte und Charakterisierung EDZ
- AP4: Installation Sandwichverschluss und Instrumentierung einschließlich EDZ
- AP5: Betrieb, Monitoring, Datenvalidierung, Auswertung und Interpretation
- AP6: Laboruntersuchungen und Materialparametrisierung
- AP7: Assessment und Modellierung
- AP8: Dokumentation und Berichtswesen

- AP2: Zu Versuchsbeginn sind ein (von 18) radialer Stresssensor sowie ein (von drei) Temperatursensor im Opalinuston ausgefallen. Die 16 installierten Porendrucksensoren liefern zuverlässig Daten.
- AP3: Siehe Projektstatusbericht der GRS zu 02 E 11799B.
- AP4: Das Widerlager des Schacht 1 wurde Ende Februar fertig installiert. Nach der Installation des Widerlagers wurde die Anschlussbelegung aller Sensoren finalisiert. Die Lieferung des Hydrationsystems aus den USA über Spanien (zur Einrichtung des angeschlossenen Wägesystems) ins Felslabor Mont Terri und die Installation am Versuchsort zogen sich bis Anfang Mai 2021. Nach einem abschließenden Funktionstest konnte die Aufsättigung des Verschlusssystems am 18. Mai 2021 beginnen. Siehe Projektstatusbericht der GRS zu 02 E 11799B, AP5. Die installierten vertikalen TDR TAUPE Sensoren zeigten einen stabilen Zustand des Sandwichverschlusses.
- AP5: Es wurde der Hydratationszeitplan sowie Abbruchkriterien für die Flüssigkeitsdruckbeaufschlagung erstellt. Dieser wird kontinuierlich entsprechend der Systemreaktion aktualisiert. Die Instrumentierung des Schacht 1 wurde vollständig in eine webbasierte Visualisierung (OASIS: overarching scientific information system) eingebunden. 91 (von 94) Sensoren (ohne ERT Sonden) liefern zuverlässig Daten. Ein Porendrucksensor sowie ein kombinierter rH/T Sensor im ES03 sind ausgefallen. Jeweils einer der beiden p und T Sensoren in der Druckkammer liefert durch ein während der Installation beschädigtes Kabel keine Daten. Die Beschädigungen führten zudem zu Fluidzutritt aus Höhe des Widerlagers in das ES5. Dieser Fluidzutritt konnte zuverlässig mit dem TDR TAUPE Sensor in ES5 beobachtet werden.
- AP6: Mineralogisch/chemische Analysen (KAK, austauschbare Kationen sowie Ionentransport) der Ausbauproben des HTV-6/HTV-7 wurden fortgesetzt.

  Der HTV-8 wurde installiert (DS: Secursol MHP1) und gestartet (Pearson Water Type A3) siehe Projektstatusbericht TUBAF zu 02 E 11799C. Für Secursol MHP1 wurde Bentonit Secursol UHP mit einem plastischen, nichtquellfähigen Ton gemischt, um den Quelldruck an die gewünschte Zielgröße anzupassen. Quelldruckversuche mit Secursol MHP1 und Pearson Wasser A3 wurden durchgeführt. Das durchströmende Fluid wird am Ausgang kontinuierlich für chemische Analysen gesammelt. MiniSandwichversuche Oe11/Oe12 laufen (Calcigel d = 1,63 g/cm³/Pearson Wasser A3) MiniSandwichversuche Oe13/Oe14 laufen (Calcigel d = 1,4 g/cm³/Pearson Wasser A3). Nach einer anfänglichen Hydratation wurde für Oe11/Oe12 eine freie Quellung von bis zu 5% (max. Volumenzunahme für DS in Schacht 1 angenommen) zugelassen, um die Quelldruckentwicklung zu untersuchen.

AP7: Siehe Projektstatusbericht des GRS zu 02 E 11799B.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

AP5: Betrieb (ab 5/2021)

AP6: Charakterisierung der Ausbauproben HTV-6 & HTV-7 sowie der MiniSandwich Oe 9/10; Fortsetzung MiniSandwich Oe11/12 und weitere; Durchführung HTV-8; Mineralogische Charakterisierung Secursol MHP1; Mineralogische Charakterisierung Opalinuston

AP7: Datenaufbereitung MiniSandwich Oe 9/10 als Grundlage für Modellierung

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   |                           | 02 E 11799B        |
| Vorhabensbezeichnung:<br>Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Haupt-<br>projekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B |                           |                    |
| <b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3           |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:         |                    |
| 01.07.2019 bis 30.06.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 1.453.730,00 EUR   | Wieczorek                 |                    |

Im Sandwich-Hauptprojekt wird im Felslabor Mont Terri (CH) ein großmaßstäbliches In-situ-Experiment zu einem vertikalen hydraulischen Verschlusssystem nach dem Sandwich-Prinzip umgesetzt. Die umfangreiche Vorplanung dazu wurde im Sandwich-Vorprojekt (02 E 11587A und 02 E 11587B) durchgeführt. Ebenso wie das Vorprojekt ist Sandwich-HP ein Verbundprojekt von GRS und KIT mit Beteiligung der internationalen Partner BGR, Swisstopo, Enresa, NWMO, RWM und ENSI. Die Projektleitung liegt bei der GRS.

Das von KIT entwickelte Sandwich-System besteht aus Wechsellagen von Bentonit-Dichtsegmenten (DS) und hydraulisch leitenden Potentialausgleichsschichten (Äquipotenzialsegmente – ES). Im Sandwich-HP werden solche Dichtsystem in zwei vertikalen Experimentalschächten von 1.2 m Durchmesser und 12 m bzw. 10 m Tiefe eingebaut. Die Dichtsysteme werden über Druckkammern im Schachttiefsten mit synthetischem Opalinuston-Porenwasser aufgesättigt, das jeweils über geneigte Zuleitungsbohrlöcher zugeführt wird. Die Schächte und das umgebende Gebirge werden zur Überwachung des Gesamtsystems intensiv instrumentiert. Die Versuchsziele umfassen die Demonstration der Einbautechnik, die Untersuchung des Aufsättigungsprozesses, die Qualifizierung der Mess- und Überwachungstechnik, die Bewertung der Wirksamkeit des Sandwich-Verschlusssystems.

- AP1: Finalisierung Testplan
- AP2: Instrumentierung Opalinuston und Probennahme Opalinuston
- AP3: Erstellung Experimentalschächte und Charakterisierung EDZ
- AP4: Installation Sandwichverschluss und Instrumentierung einschließlich EDZ
- AP5: Betrieb, Monitoring, Datenvalidierung, Auswertung und Interpretation
- AP6: Laboruntersuchungen und Materialparametrisierung
- AP7: Assessment und Modellierung
- AP8: Dokumentation und Berichtswesen

- AP1: Beendet.
- AP2: Nahe Schacht 1 fiel der Porenwasserdruck von zuvor 0.4 0.6 MPa als Reaktion auf die Abteufung erwartungsgemäß allmählich bis nahe oder sogar unter Umgebungsdruck, d. h. der Nahbereich des Schachts ist durch die Auflockerung in einem Saugspannungszustand. In der Mitte zwischen beiden Schächten blieb jedoch ein (weiterhin fallender) positiver Porendruck erhalten. Die begonnene Aufsättigung des Dichtsystems in Schacht 1 (siehe AP5) hat noch keine signifikante Auswirkung auf den Porendruck, während bei den Spannungssensoren eine mechanische Reaktion auf die Druckbeaufschlagung der Injektionskammer beobachtet wird.
- AP3: Beide Schächte wurden bis Anfang November 2020 fertiggestellt. Oberflächenpackermessungen der BGR zur Untersuchung der Auflockerungszone um Schacht 1 wurden inzwischen ausgewertet und zeigen eine signifikante Erhöhung der Gaspermeabilität im unmittelbaren Nahbereich der Schachtoberfläche (ca. 1 cm), die durch Auflockerung und Entsättigung bei der Schachtabteufung entsteht.
- AP4: Die Installationsarbeiten in Schacht 1 wurden mit dem Einbau des Stahlrohrwiderlagers und des Hydratationssystems abgeschlossen. Siehe Projektstatusbericht des KIT zu 02 E 11799A.
- AP5: Am 18.05.2021 wurde die Aufsättigung des Dichtsystems in Schacht 1 mit der Flutung der Druckkammer begonnen. In mehreren Schritten wurde zunächst der Wasserpegel im Befüllungsbohrloch erhöht und damit ein geringer Wasserdruck aufgeprägt. Anschließend wurde der Befülltank in zwei Schritten am 1.6.2021 und 3.6.2021 mit einem konstanten Gasdruck und damit die Druckkammer mit einem Wasserdruck von 3.3 bzw. 3.9 bar Absolutdruck beaufschlagt. Im zweiten Schritt wurden Wasserzutritte an der Oberfläche über zwei Kabel festgestellt (das Wasser wird unter der Isolierung hochgedrückt). Daher wurde die Druckkammer zunächst entlastet. Nach Abdichtmaßnahmen wurde die Aufsättigung am 7.7.2021 fortgesetzt. Der aktuelle Druck in der Druckkammer beträgt ca. 4.8 bar absolut.
- AP6: Siehe Projektstatusbericht des KIT zu 02 E 11799A.
- AP7: Zur Kalibrierung des Double-Structure-Modells zur Beschreibung des Bentonits wurden weitere Rechnungen mit dem radialsymmetrischen Modell von Schacht 1 durchgeführt.
- AP8: Zur auf März 2022 verschobenen DAEF-Konferenz "3rd Conference on Key Topics in Deep Geological Disposal" und zur "SafeND" Konferenz des BASE im November 2021 wurden Abstracts eingereicht. Der erste Datenbericht und der "As-built Report" für Schacht 1 werden zurzeit bearbeitet.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Installation fünf weiterer Minipiezometer in der Umgebung von Schacht 2 (ab November 2021)
- AP4: Planung von Dichtsystem und Instrumentierung für Schacht 2 (ab August 2021)
- AP5: Weiterführung der Aufsättigung des Verschlusssystems in Schacht 1
- AP7: Fortsetzung der hydraulisch-mechanischen Simulationsrechnungen

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:  |                           | Förderkennzeichen: |
|---|---------------------------|--------------------|
| Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6,                           |                           | 02 E 11799C        |
| 09599 Freiberg  | 9599 Freiberg             |                    |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                    |
| Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Haupt- |                           |                    |
| projekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C  |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle          |                           |                    |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                                |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitraum:         |                    |
| 01.09.2020 bis 31.08.2022   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                    |
| 199.115,00 EUR  | Dr. Gruner                |                    |

Im Sandwich-Hauptprojekt wird im Felslabor Mont Terri (CH) ein großmaßstäbliches In-situ-Experiment zu einem vertikalen hydraulischen Verschlusssystem nach dem Sandwich-Prinzip umgesetzt. Die umfangreiche Vorplanung dazu wurde im Sandwich-Vorprojekt (02 E 11587A und 02 E 11587B) durchgeführt. Ebenso wie das Vorprojekt ist Sandwich-HP ein Verbundprojekt von GRS, KIT und TUBAF mit Beteiligung der internationalen Partner BGR, Swisstopo, Enresa, NWMO, RWM, ENSI. Die Projektleitung liegt bei der GRS.

Das von KIT entwickelte Sandwich-System besteht aus Wechsellagen von Bentonit-Dichtsegmenten (DS) und hydraulisch leitenden Potentialausgleichsschichten (Äquipotenzialsegmente – ES). Im Sandwich-HP werden solche Dichtsysteme in zwei vertikalen Experimentalschächten von 1,18 m Durchmesser und knapp 12 m bzw. 10 m Tiefe eingebaut. Die Dichtsysteme werden über Druckkammern im Schachttiefsten mit synthetischem Opalinuston-Porenwasser aufgesättigt, das jeweils über geneigte Zuleitungsbohrlöcher zugeführt wird. Die Schächte und das umgebende Gebirge werden zur Überwachung des Gesamtsystems intensiv instrumentiert. Die Versuchsziele umfassen die Demonstration der Einbautechnik, die Untersuchung des Aufsättigungsprozesses, die Qualifizierung der Mess- und Überwachungstechnik sowie die Bewertung der Wirksamkeit des Sandwich-Verschlusssystems.

- AP1: Finalisierung Testplan
- AP2: Instrumentierung Opalinuston und Probennahme Opalinuston
- AP3: Erstellung Experimentalschächte und Charakterisierung EDZ
- AP4: Installation Sandwichverschluss und Instrumentierung einschließlich EDZ
- AP5: Betrieb, Monitoring, Datenvalidierung, Auswertung und Interpretation
- AP6: Laboruntersuchungen und Materialparametrisierung
- AP7: Assessment und Modellierung
- AP8: Dokumentation und Berichtswesen

Das Teilvorhaben der TU Bergakademie Freiberg bezieht sich auf die Arbeitspakete AP4, AP6 und AP8 des Verbundvorhabens.

- AP4: Mitarbeit am Plan der Druckbeaufschlagung. Mit den Projektpartnern wurden die Abbruchkriterien beim Verlauf der Flüssigkeitsdruckbeaufschlagung beim In-situ-Versuch 1 in Mont Terri abgestimmt.
- AP6: Die Dichtsegmente im halbtechnischen Versuch HTV-8 bestehen aus dem Bentonit der Bezeichnung Secursol MHP1 (70/30). Der Aufbau ist mit dem vorherigen Versuch HTV-7 vergleichbar. Nach Anlieferung der Materialien Mitte März 2021 wurde mit dem Einbau begonnen. Dabei wurden der Wassergehalt und die Korndichte der Materialien nochmals erfasst und die vorgesehenen Einbaudichten realisiert. Der Einbau wurde am 23.4.2021 beendet.

Am 4.5.2021 wurde mit der Flüssigkeitsdruckbeaufschlagung mit Pearson-Water begonnen. Die bisherigen Druckstufen sind 2,5 bar -3 bar -5 bar -8 bar -10 bar -15 bar -20 bar -25 bar -30 bar.

Mit zunehmender Flüssigkeitsdruckbelastung hat sich der eingehende Volumenstrom stabilisiert. Während der konstanten Druckstufen verringert sich der eingehende Volumenstrom mit der Zeit. Bei konstant 30 bar Flüssigkeitsdruck liegt der eingehender Volumenstrom bei < 0.01 Liter/h.

AP8: Die Messsignale des Versuches HTV-8 werden laufend ausgewertet und die Ergebnisse an die Projektpartner übergeben.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP4: Mitarbeit an der Auswertung des Verlaufs des In-situ-Versuches 1 in Mont Terri
- AP6: Fortsetzung der Flüssigkeitsdruckbeaufschlagung des halbtechnischen Versuches HTV-8
- AP8: Zuarbeit zum Bericht zum Verlauf des halbtechnischen Versuches HTV-8

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   |                           | 02 E 11809A        |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |
| Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische Modellierung im regio- |                           |                    |
| nalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt A   |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle       |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.3   |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.07.2019 bis 30.12.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 1.175.210,00 EUR   | Schneider                 |                    |

Mit d³f++ steht ein Werkzeug zur Modellierung der thermohalinen Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse und geklüftete Medien zur Verfügung, das seit 1995 im Rahmen der BMWi-geförderten Vorhaben GRUPRO, TRAPRO, E-DuR, A-DuR, H-DuR und GRUSS entwickelt wurde. Derzeit wird es im Rahmen der Projekte SUSE, SMILE, AN-SICHT-II und go-CAM auf endlagerrelevante und weitere Fragestellungen angewendet. Ziel von HYMNE sind die Erweiterung und Verbesserung der Anwendbarkeit von d³f++ auf Modelle mit freier Grundwasseroberfläche im Sedimentgestein und im Kristallin und eine Erhöhung der Prognosesicherheit. Teilziele sind die Erweiterung auf die Simulation der Grundwasserbewegung unter Permafrostbedingungen, eine Automatisierung der Modellkalibrierung, numerische Verbesserungen sowie Test und Anwendung des Codes. Die Bearbeitung erfolgt in Kooperation mit der Universität Frankfurt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP1: Erweiterung der Anwendbarkeit

AP1.1: Kalibrierung (Anforderungen, begleitende Arbeiten)

AP1.2: Kopplung mit Vorflutern (Konzept)

AP1.4: Technische Verbesserungen (Konzepte)

AP2: Grundwasserbewegung unter Permafrostbedingungen (Konzepte)

AP4: Anwendungsrechnungen

AP4.1: Äspö site descriptive model (SDM)

AP4.2: Kraví Hora

AP4.3: INTERFROST

AP5: Wartung des Codes (Unterauftrag) AP6: Projektleitung und Dokumentation

- AP1.1: Das Kalibrierungswerkzeug wurde auf ein Beispiel in regionalem Maßstab (1000 km²) erfolgreich angewendet.
- AP1.2: An der Umsetzung der Vorfluter-Kopplung arbeitet derzeit ein Masterstudent in Frankfurt.
- AP1.4: Es wurden mehrere Funktionen implementiert, um für das Äspö-SDM (AP4.1) bessere Ergebnisse zu erzielen.
- AP2: Die Erhaltungsgleichungen für die Masse an Grundwasser (einschließlich Eis) und für die Wärmeausbreitung wurden in einer möglichst allgemeinen Form aufgestellt. Außerdem wurden die dafür benötigten thermodynamischen Zustandsgleichungen für Temperaturen zwischen -40 °C und +200 °C zusammengestellt und als analytische Gleichungen formuliert.
- AP4.1: Die ausgewählten Deformationszonen wurden vereinfacht, miteinander verschnitten und vernetzt. Die resultierende Struktur muss mit dem Modellgrenzen verschnitten und das ganze tetrahedrisiert werden. Es deutet sich allerdings an, das alternative Vernetzungsmöglichkeiten gefunden werden müssen, um die Zahl der Gitterelemente bei dem fertigen Modell möglichst klein und das Modell dadurch für Berechnungen handhabbar zu halten.
- AP4.2: Der Aufbau des Kraví Hora-Modells ist in Arbeit, derzeit wird der Präprozessor an die Anforderung der Einbettung eines detaillierten Modells in ein Regionalmodell angepasst.
- AP4.3: Die Benchmarkfälle TH2 und TH3 aus dem INTERFROST-Projekt wurden so aufbereitet, dass eine Eingabe in d<sup>3</sup>f++ direkt erfolgen kann. Die Ergebnisse der ersten Modellrechnungen weichen noch von den Kurven aus dem INTERFROST-Projekt ab, zeigen aber einen richtigen Trend.
- AP5: Es wurden Weiterentwicklungen des Präprozessors (Gitteroptimierung) vorgenommen, weitere Features zur Dateneingabe implementiert sowie Unterstützung bei numerischen Problemen und dem Modellaufbau (AP4.1 und 4.2) geleistet.
- AP6: Am 26.02. und 16.07.2021 fanden Projektgespräche mit allen Projektpartnern als Videokonferenzen statt.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.1: Die Arbeiten werden fortgeführt.
- AP1.2: Die Implementierung wird umgesetzt.
- AP2: Formulierung von vereinfachten, problemspezifischen Gleichungen für spezielle Anwendungen. Vergleich der Erhaltungsgleichungen, Zustandsgleichungen und konstitutiven Beziehungen mit Ansätzen aus der Literatur.
- AP4.1: Fortführung der Arbeiten am 3D-Gitter, Umsetzung einer freien Oberfläche im regionalen 3D-Modell.
- AP4.2: Abschluss des Modellaufbaus und Beginn der Simulationen.
- AP4.3: Überprüfung der implementierten Formulierungen zur Verbesserung der Simulationsergebnisse.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |  | Förderkennzeichen: |
|--|--|--------------------|
| Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Theo-                          |  | 02 E 11809B        |
| dor-WAdorno-Platz 1, 60323 Frankfurt am Main   | dor-WAdorno-Platz 1, 60323 Frankfurt am Main |                    |
| Vorhabensbezeichnung:  |  |                    |
| Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische Modellierung im regio- |  |                    |
| nalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B   |  |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle       |  |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.3   |  |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:                            |                    |
| 01.10.2019 bis 30.09.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021                    |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:                               |                    |
| 957.067,00 EUR   | Lemke  |                    |

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist die Erweiterung und Verbesserung der Anwendbarkeit von d³f++ auf Modelle mit freier Grundwasseroberfläche im regionalen Maßstab im Sedimentgestein und im Kristallin sowie einer Erhöhung der Prognosesicherheit.

Teilziel 1 (abgebildet in AP1) ist die Verbesserung der Anwendbarkeit von d³f++ durch den Einbau einer halbautomatischen, interaktiven Modellkalibrierung, eine bessere Berücksichtigung des Vorflutereinflusses, das Ermöglichen einer freien Grundwasseroberfläche im Kluftgestein sowie einige technische Verbesserungen. Dadurch wird nicht zuletzt die Prognosesicherheit erhöht. Teilziel 2 (abgebildet in AP2) ist die Erweiterung des Anwendungsbereiches auf die Modellierung der Grundwasserströmung unter Permafrostbedingungen. Teilziel 3 (abgebildet in AP3) ist die Weiterentwicklung der Lösungsverfahren im Hinblick auf eine einfachere Nutzbarkeit. Die Verfahren bieten sehr viele Möglichkeiten. Um diese erfolgreich einzusetzen sind oft noch Experten nötig. Zur breiteren Nutzbarkeit, insbesondere in der Anwendung auf große Regionalmodelle, sollen die Robustheit der Verfahren erhöht und viele der Schritte, die bisher noch manuell durchgeführt werden, etwa in der Gitterverfeinerung, automatisiert werden. Diesem Ziel dient auch die Neustrukturierung der Software. Teilziel 4 (abgebildet in AP4) besteht in einer Erhöhung des Vertrauens in die Ergebnisse von Grundwasserströmungs- und Transportsimulationen durch die Anwendung von d³f++ auf endlagerrelevante Aufgabenstellungen im regionalen Maßstab.

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Die große Nutzergemeinde des Simulationssystems UG ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse.

Es erfolgt eine Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, und der Firma TechSim, Kieselbronn, als Unterauftragnehmerin der GRS.

Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben der zwei BMWi-Projekte vom 01.03.2012 – 31.10.2015 (FKZ 02 E 11062) und vom 01.04.2016 – 31.07.2019 (FKZ 02 E 11476).

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete vom G-CSC (Goethe-Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen) der Universität Frankfurt bearbeitet:

- AP1: Erweiterung der Anwendbarkeit (Kalibrierung, Kopplung mit Vorflutern, Zusammenspiel freie Oberfläche Kluftgestein, technische Verbesserungen)
- AP2: Grundwasserbewegung unter Permafrostbedingungen
- AP3.1: Verbesserung der Robustheit der Löser durch hybride AMG-GMG Kombination
- AP3.2: Softwareintegration und Neustrukturierung
- AP3.3: Entwicklung und Implementierung eines voll-gekoppelten VOF-Verfahrens
- AP4: Anwendungsrechnungen (Äspö site descriptive model, Kraví Hora, INTERFROST)

AP1: Eine wesentliche Schwierigkeit bei der Kalibrierung ist, dass mehrere Probleme mit verschiedenen hydrogeologischen Parametern für eine ausreichend lange Modellzeit gelöst werden sollen. Um die Rechenzeiten in einem sinnvollen Bereich zu halten, müssen insbesondere lange Zeitschritte verwendet werden, bei denen die im Raum hochfrequenten Anteile der Diskretisierungsfehler der phreatischen Oberfläche wachsen. Dies führt zu einer sehr ungenauen Abschätzung sowohl von den Positionen der freien Oberfläche in den Messpunkten, wie auch von den für die automatisierte Kalibrierung verwendeten Gradienten. Um diese hochfrequenten Anteile der Fehler zu dämpfen, wurde für die Level-Set-Verfahren eine diffusionsbasierte Stabilisierung implementiert. Der Diffusionsparameter hängt dabei von der Gitterweite und Zeitschrittlänge ab und soll möglichst klein gewählt werden, um die Konvergenz der numerischen Lösung zur analytischen Lösung zu sichern. Die numerischen Experimente haben die Effizienz dieser Vorgehensweise bestätigt. Aus dem gleichen Grund musste die Dispersion in den Transportgleichungen an der freien Oberfläche besonders betrachtet werden.

Zudem musste der Code von d³f und ug4 angepasst werden, damit die Rechenprogramme weiterhin lauffähig sind. Die Compiler-Parameter für d³f und ug4 werden über ein plattformunabhängiges Programmierwerkzeug CMake konfiguriert. Die für unseren Code passende CMake-Version (Version 2.6 für ug4 und d³f) muss dabei in den CMake-Skripten angegeben werden. Diese Version wird in Zukunft nicht mehr unterstützt. Daher wurden d³f und ug4 auf die aktuellere Version von CMake angepasst. Ein wesentlicher Schritt war ferner die Anpassung von ug4 an die neuere Version von BoostCPP, die ug4 benötigt. Wegen einer möglichen Beeinträchtigung anderer Entwicklungen von diesen Änderungen, werden die Anpassungen derzeit getestet.

AP2: Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

AP3.1: Es wurden weitere Anstrengungen unternommen, die Durchführbarkeit des SGMG (Subdivision based Geometric Multigrid)-Verfahrens innerhalb des Simulationsframeworks ug4 (https://github.com/ UG4/ugcore) mit Hilfe der Bereitstellung geeigneter Grobgitter der im Vorhaben HYMNE zu Grunde liegenden Gebietsrepräsentationen sicherzustellen. Ein besonderer Fokus lag hierbei im Sinne einer ausgedehnten Optimierung des Workflows zur Gittergenerierung in der Veröffentlichung der Meshing Software ProMesh (http://www.promesh3d.com) in der neuen Version 4.3.19, die alle im gesamten Projektzeitraum eingeführten Neuerungen in die Basis gebende ug4 Gitterbibliothek lib\_grid und das ug4 Plugin plugin\_ProMesh bündelt. Dazu gehören die Einschränkung der allgemeinen Selektion auf einzelne Subsets, die richtungsbasierte Kantenselektion auf einzelne Subsets, die Schnittstelle zur Anmeldung und Überwachung versionierter Mesh-Skript Ordner, die Elementselektion nach multiplen Attributen sowie die Selektion der zu einer Koordinate nächstgelegenen Kante.

AP3.2: Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

AP3.3: Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

AP4: Die Arbeit am Äspö Site Descriptive Model (SDM) Deformationszonen innerhalb des Kristallingesteins mit erhöhter Zerklüftung dreidimensional aufzulösen wurde fortgeführt. Zu diesem Zweck wurden dafür vorgesehene Meshing-Skripte mit dem Kooperationspartner GRS entwickelt, mit denen die automatisierte Rekonstruktion einzelner und die konforme Verschneidung mehrerer Deformationszonen sowie korrespondierende Volumengittergenerierung realisiert werden kann. Die Qualitätssteigerung der erzeugten Volumengitter bleibt vor dem Hintergrund numerischer Effizienz überdies Gegenstand aktueller Bestrebungen.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:   |                           | Förderkennzeichen:       |
|--|---------------------------|--------------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   |                           | 02 E 11819               |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                          |
| Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Te                                 | emperaturen in ge         | eklüfteten Kristallinge- |
| steinen und Barrierematerial (MUSE)  |                           |                          |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                          |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                       |                           |                          |
| aufzeit des Vorhabens: Berichtszeitraum:                                       |                           |                          |
| 01.08.2019 bis 31.07.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                          |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                          |
| 1.736.012,50 EUR   | Dr. Flügge                |                          |

Das Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (Standortauswahlgesetz – StandAG) vom Juli 2013 bzw. Mai 2017 regelt das Auswahlverfahren für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle in Deutschland. Dabei kommen grundsätzlich die Wirtsgesteine Steinsalz, Tongestein und Kristallingestein in Betracht. Im Rahmen der Forschungsvorhaben CHRISTA, KONEKD, CHRISTA-II, SUSE und UMB wurden bzw. werden einerseits verschiedene Fragestellungen bezüglich des technischen Konzepts und des Sicherheits- und Nachweiskonzepts für ein Endlager im Kristallingestein bearbeitet, und andererseits Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren als Funktion von Lösungszusammensetzung, Temperatur und mikrobieller Aktivität untersucht.

Basierend auf den genannten Arbeiten und in ihrer Fortführung soll in dem hier skizzierten Projekt MUSE (i) die Übertragbarkeit der mit der im Projekt SUSE entwickelten neuen Methode gewonnenen Sorptionsdaten überprüft und die Anwendbarkeit auf andere Kristallinstandorte durch Erhebung einer Bandbreite von Sorptionsdaten im Kristallingestein getestet werden, (ii) eine Methode zur Untersuchung des Einflusses von erhöhten Temperaturen auf Mineralumwandlungen und Gasfreisetzung in Kluftfüllungen entwickelt werden und (iii) Mechanismen der Bentonitumwandlung und Gasfreisetzung untersucht werden.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP1: Übertragbarkeit der normierten Verteilungskoeffizienten zwischen verschiedenen Kristallin-Standorten
- AP2: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Kluftfüllungen
- AP3: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Bentoniten
- AP4: Dokumentation und Projektleitung

- AP1: Die Desorptionsversuche mit der Korngrößenfraktion 1-2 mm der Kristallin-Kernproben und den synthetischen Grundwässern für das URL Bukov (Tschechien) und das URL KURT (Südkorea) wurden bei 10 °C und 80 °C begonnen und inzwischen für zwei der insgesamt zehn zu untersuchenden Kernproben (Gneis-S8 vom URL Bukov und Granite-914m vom URL KURT) abgeschlossen. Um in Desorptionsbatches mit weiteren, z. T. Kalzit-reichen Kernproben kontrollierte CO<sub>2</sub>-Partialdruckbedingungen einstellen zu können, sollen diese in je einem mit Wippen ausgestatteten Kühl- bzw. Thermoschrank in gasdichten Flanschgefäßen untergebracht. Die dafür notwendige Ausstatung wurde angeschafft. Die Aufschlüsse zwecks einer erweiterten Charakterisierung der Kernproben wurden mit der 18 % HCl und dem Königswasser für sechs Kernproben (Gneiss-S8, Fracture-S8, Granite-458m, Granite-914m, Granite-954m, Granite-965m) durchgeführt und die ICP-MS-Messungen ausgewertet. Die Herstellung der Dünnschliffe für eine petrografische Charakterisierung der Kernproben wurde in Auftrag gegeben.
- AP2: Die persönliche Übergabe der 15 Kristallin-Kleinkerne aus einem Dolerit-Kern und einem Gneis-Kern von IGEM RAN an GRS konnte Corona-bedingt immer noch nicht realisiert werden. Es wird in diesem Zusammenhang überlegt, die Charakterisierung der tschechischen und südkoreanischen Kernproben an einen alternativen Auftragnehmer in Deutschland zu vergeben.
- AP3: Die 35 Versuche bei 120 °C mit den vom IGEM RAN an die GRS übergebenen vier Bentoniten wurden aufgrund eines anhand der Zwischenergebnisse festgestellten methodischen Fehlers abgebrochen. Dieser methodische Fehler bestand in der Einstellung eines erhöhten N2-Gasdrucks zur Unterdrückung der Wasserverdampfung in den Metallzylindern. Da allerdings bei dieser Einstellung keine ausreichende Genauigkeit erreicht werden konnte, ließ sich kein quantitativer Vergleich der erzeugten CO<sub>2</sub>-Drucke aus den Daten ableiten. Die Versuchsreihe wurde neu angesetzt und gestartet.
- AP4: Kommunikation mit IGEM RAN (Russland), KAERI (Südkorea) und SÚRAO (Tschechien). Der GRS werden möglicherweise doch noch Kernproben aus China im Rahmen der Deutsch-Chinesischen Zusammenarbeit zur Verfügung gestellt.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fortsetzung der Desorptionsexperimente.
- AP2: Beginn der Versuche mit Kristallin-Proben vom URL Bukov, falls ein alternativer Auftragnehmer für die Probenvorbereitung- und -charakterisierung gefunden wird.
- AP3: Abschluss der 1. Versuchsreihe mit vier für das russische Endlagerprogramm relevanten Bentoniten. Start der 2. Versuchsreihe mit dem tschechischen Bentonit.
- AP4: Durchführung der Abstimmungen mit Partnern des IGEM RAN zur Diskussion der geplanten und laufenden Laborexperimente, inkl. Bereitstellung von Probenmaterial. Vorbereitung und Vergabe des Auftrags zu Mineralogie- und Kluftstrukturuntersuchungen von Kristallingesteinen aus Tschechien und Südkorea.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   |                           | 02 E 11829         |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |
| Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Pha   | se 25 (MonTe-2            | 5)                 |
| <b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2 |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.07.2019 bis 30.06.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 1.026.220,00 EUR   | Dr. Czaikowski            |                    |

Als Partner im Betreiber-Konsortium führt die GRS seit 1999 im Auftrag des BMWi Forschungsarbeiten im schweizerischen Untertagelabor Mont Terri im Opalinuston durch.

Die Fortführung der Arbeiten zur Tonforschung in Mont Terri in den kommenden Phasen dient

- (1) der Erarbeitung eines fundierten Verständnisses der für die Systementwicklung wichtigen thermisch-hydraulisch-mechanischen (THM) Prozesse,
- (2) der Entwicklung qualifizierter Prozessmodelle durch Vergleich von Modellrechnungen mit Experimenten in situ und im Labor,
- (3) der Sammlung zuverlässiger Daten zum Materialverhalten zur Qualifikation der Prozessmodelle; dazu Entwicklung bzw. Verbesserung von Messmethoden und
- (4) dem Wissenserwerb durch die Zusammenarbeit mit internationalen Fachkollegen.

# 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, BGR, Obayashi)
- AP3: DM-A Experiment Langzeitverformungsmessung des Tonsteins in einem Bohrloch
- AP4: Keine Fortführung der Arbeiten zum SB-A Experiment
- AP5: Keine Fortführung der Arbeiten zum DB Experiment
- AP6: Auslagerung weiterführender Arbeiten zum LT-A Experiment in einer eigenen Vorhabenskizze
- AP7: Weiterentwicklung von VIRTUS für den Einsatz im Tonstein
- AP8: Mine-By Experiment (MB-A) in der sandigen Fazies (mit BGR und Swisstopo)
- AP9: CD-A Experiment in der sandigen Fazies (Konsortialführer BGR)
- AP10: Technical und Steering Meetings

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die GRS verwendet für die Modellierung den FEM-Code CODE\_BRIGHT. Die Modellierungsarbeiten werden simultan zu dem Vorgehen im internationalen Projekt DECOVA-LEX 2021 mit steigender Komplexität durchgeführt. Im ersten Schritt erfolgte die Betrachtung eines 2-dimensionalen Models von einer rein-thermischen Modellierung, über eine

thermisch-hydraulisch gekoppelte Modellierung bis hin zu einer voll thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Modellierung. Bereits bei der rein-thermischen Modellierung zeigten sich Unterschiede in den Ergebnissen der Projektpartner. Die Abweichungen der GRS wurden zurück geführt auf einen Fehler im FEM-Code, so dass die Anisotropie im 2-dimensionalen Fall, primär parallel zur Schichtung, nicht korrekt berechnet wurde. Dieses Problem konnte im Zuge der Arbeiten gelöst werden und eine gute Übereinstimmung der Temperaturkurven mit den Partnern erzielt werden. Beim Vergleich der TH-gekoppelten Modellierungsergebnissen fielen die GRS Ergebnisse durch den hohen Porendruck auf. Anders als die anderen eingesetzten Rechencodes berücksichtigt CODE\_BRIGHT keine durch hydraulische Effekte induzierten Porositätsänderung, wodurch sich ein hoher Porendruck aufbaut. Dieser Effekt wird bei der Synthese berücksichtigt. Einen Erfolg konnte die GRS bei der Modellierung des THM-gekoppelten Models verbuchen. Hier konnten die Schwierigkeiten bezüglich der Integration des anisotropen mechanischen Verhaltens über die Anwendung und Vereinfachung eines komplexeren Stoffmodels gelöst werden.

- AP2: Die Messungen wurden fortgeführt, die Messwerte zeigen die Tendenz der Vorjahre. Im 2. Hj ist ein Treffen der Experimentpartner vorgesehen, bei dem die weitere Vorgehensweise (Abkühlung und Rückbau) festgelegt werden soll.
- AP3: Die Messungen wurden fortgeführt, die Messwerte zeigen eine deutliche Reaktion auf die Streckenerweiterung durch Zunahme der Porendrücke und Temperaturwerte.
- AP7: VIRTUS wurde um die Funktion zur Translation beim Einlesen von Laserscandaten von IFF erweitert und von der GRS beim Einlesen der Laserscandaten in CD-A angewendet.
- AP8: Keine Arbeiten im Berichtszeitraum.
- AP9: Die Messungen wurden fortgeführt, die Messwerte zeigen folgende Tendenz: Die Sensoren im Bereich des Spritzbetonausbaus zeigen eine konstante Abnahme des Drucks durch den Einfluss der bewetterten Gallery. Mit sinkendem Abstand der Sensoren zur Nische nimmt auch der Druck ab. Im Bereich des Stahlringausbaus starten die Messungen mit einem stark abgesunkenen Druck. Der nischenfernste Sensor zeigt einen leichten Druckanstieg. Die Messdaten lassen somit eine klare Unterscheidung zwischen den Ausbauarten zu. Neben den Porendruckmessungen beteiligt sich die GRS an den Modellierungsarbeiten. Hierfür konnten mithilfe von VIRTUS die Laserscandaten so aufbereitet werden, dass ein Model für die numerische Simulation erstellt werden konnte. Dieses Model wird weiter auf-

bereitet und fehlende Geometrien hinzugefügt. Zudem wurde ein weniger komplexes Model mit vereinfachter Geometrie erstellt, welches in den ersten Modellierungen verwendet wird. Innerhalb des letzten halben Jahres gab es bereits mehrere Treffen in einer Gruppe mit BGR Kollegen, in denen ein gemeinsames Vorgehen und ein einheitlicher Parametersatz besprochen wurde.

AP10: Teilnahme an den virtuell durchgeführten Steering Meetings im 1. Hj.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Messungen in den laufenden Experimenten
- Durchführung begleitender Modellierungen zu den laufenden Experimenten

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:   |                        | Förderkennzeichen:         |  |
|--|------------------------|----------------------------|--|
| BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 3  | 31224 Peine            | 02 E 11839                 |  |
| Vorhabensbezeichnung:  |                        |                            |  |
| Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegt                                       | ung und zum Nachweis v | von geotechnischen Barrie- |  |
| ren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS)                          |                        |                            |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                        |                            |  |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                       |                        |                            |  |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra         | aum:                       |  |
| 01.10.2019 bis 31.12.2022  | 01.01.2021 bis         | 01.01.2021 bis 30.06.2021  |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:         | Projektleiter:             |  |
| 412.889,06 EUR   | Simo                   |                            |  |

Geotechnische Barrieren für ein Endlager in Salzformationen wurden schon im Rahmen zahlreicher Forschungsprojekte behandelt. Im Rahmen der vorläufigen Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben (VSG) wurde ein Nachweisverfahren für die Integrität von Verschlusselementen in einem HAW Endlager in steil-lagernden Salzformationen entwickelt. Im Projekt ELSA wurden Schachtverschlüsse für HAW-Endlager ausführlich behandelt. Erste Empfehlungen zur Planung und Ausführung von geotechnischen Barrieren wurden vom Arbeitskreis Salzmechanik der DGGT formuliert. Die BGE und BGE TECHNOLOGY entwickeln und bauen seit über zehn Jahren Strömungsbarrieren im Endlager Asse. Mittlerweile wurden 32 Strömungsbarrieren im Routinebetrieb gebaut. Ein Prototypabdichtbauwerk wurde von der BGE im realen Maßstab im Endlager Morsleben gebaut und wird gerade wissenschaftlich untersucht. Trotz umfangreichen Wissen und Erfahrung über geotechnischen Barrieren in Salzformationen, fehlt es an Regelwerke für eine qualitätsgesicherte Auslegung solcher Bauwerke für ein HAW-Endlager.

In Kollaboration mit SANDIA National Laboratories setzt sich BGE TECHNOLOGY im Vorhaben RANGERS zum Ziel, einen Leitfaden zu entwickeln, in dem das vorhandene Wissen und die gesammelte Erfahrung über geotechnische Barrieren im Salz in Deutschland und in den USA einfließen. Empfehlungen zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren basierend auf den Stand der Wissenschaft und Technik sind zu formulieren und ein Überblick über neuartige Konzepte, Baustoffe und Technologien, die den Stand der Technik von Morgen prägen werden, wird gegeben.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP0: Organisation der Zusammenarbeit zwischen BGE TEC und SANDIA Literaturrecherche zu geotechnischen Bauwerken im Salz
- AP1: Zusammenstellung des Standes der Wissenschaft und Technik bei der Planung und Bau von geotechnischen Barrieren für Endlager im Salz
- AP2: Herleitung und Zusammenstellung der Randbedingungen und Anforderungen
- AP3: Entwicklung des Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW-Endlager in Salzformationen
- AP4: Nutzung des Leitfadens für die Auslegung und den Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein im FuE-Vorhaben KOSINA entwickelte generische Endlagerkonzepte
- AP5: Bewertung der Ergebnisse und Vergleich mit Erkenntnissen aus früheren Projekten
- AP6: Dokumentation und Abschlussbericht

- AP1: Es wurde ein Entwurf des ersten WuT-Teilberichts erstellt. Der Bericht beinhaltet einen Überblick über die Projekte ELSA, VSG und ISIBEL sowie die Vorgehensweise beim Bau von Strömungsbarrieren in der Schachtanlage Asse als auch die konzeptionellen Arbeiten der BGE bei der Entwicklung von Streckenverschlüssen im ERAM. SANDIA hat im Berichtszeitraum eine Zusammenfassung aller im Rahmen von Forschungsprojekten in den USA durchgeführten Arbeiten zum Verschluss von Endlagern im Salz erstellt. Beide Berichtsteile sollen im nächsten Berichtszeitraum zusammengeführt und finalisiert werden.
- AP2: Die im letzten Berichtszeitraum durchgeführte 2D-Planung des Endlagerbergwerks wurde um ein 3D-Modell des Endlagers ergänzt. Das generische Salzkissenmodell aus dem KOSINA-Projekt wurde dabei zugrunde gelegt. Basierend darauf wurden die geotechnischen Barrieren dreidimensional in der Geologie geplant. Die Erkenntnisse aus den Projekten KOSINA und ELSA sowie die Erfahrungen aus Morsleben flossen in die Planung ein.
- AP3: Die Zielsetzung des AP3 wurde aufgrund von potenziellen Konflikten mit dem Planfeststellungsverfahren für Endlager für Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung und mit der etablierten Praxis bei dem Verschluss von Untertagedeponien in Deutschland sowie wegen der teils sehr unterschiedlichen regulativen Anforderungen in den USA überdacht und neu ausgerichtet. Das Hauptziel des Vorhabens, die Erarbeitung einer Methodik zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW-Endlager in Salzformationen, bleibt weiterhin bestehen. Dies wird aber im Weiteren nur als Methodik ohne Anspruch auf eine Allgemeingültigkeit für Endlagerbau im Salz für das Projekt RANGERS weiterverfolgt. Das ursprüngliche Ziel, einen allgemeingültigen Leitfaden zu formulieren, wird nicht mehr verfolgt. Die neue Zielsetzung erlaubt mehr Freiräume in der Bearbeitung. Zusätzlich zu den bisher betrachteten Themen wird der Gastransport in einem Endlagersystem im Salz betrachtet. Die Methodik zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW-Endlager in Salzformationen wurde im Berichtszeitraum in engerer Abstimmung mit dem amerikanischen Projektpartner bearbeitet. Für die numerische Umsetzung der Methodik wurde ein Modellierungskonzept erstellt. Dieses ist die Grundlagen für die Arbeiten im AP4.
- AP4: Es wurde ein numerisches Modell für die anstehenden Modellierungsarbeiten entwickelt. Es handelt sich dabei um eine dreidimensionale Abbildung des Endlagersystems mit allen geo-technischen Barrieren. Das Modell soll für thermomechanische Berechnungen bei BGE TEC sowie für Transportberechnungen bei SANDIA verwendet werden. Dafür wird es derzeit von SANDIA konvertiert und so für den Einsatz im numerischen Code PFLOTRAN vorbereitet.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: WuT-Teilberichtsentwürfe werden mit SANDIA abgestimmt und finalisiert
- AP2: Dokumentation der Auslegung der geotechnischen Barrieren
- AP3: Weiterentwicklung der entwickelten Methodik
- AP4: Durchführung von prototypischen numerischen Berechnungen zum Test der Rechenbarkeit des Modells

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

WM2021 Conference 2021– Paper N°21132: Methodology for Design and Performance Assessment of Engineered Barrier Systems in a Salt Repository for HLW/SNF

WM2021 Conference 2021– Poster N°21128: Design Methodology Comparison for HLW/SNF Repositories in Germany and the US

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen:         |
|--|---------------------------|----------------------------|
| Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH -   | – UFZ <b>-</b> ,          | 02 E 11850A                |
| Permoserstr. 15, 04318 Leipzig   |                           | 02 E 11830A                |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                            |
| Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgung   | sforschung – Pi           | ilotprojekt: Reanalysis of |
| BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Testing Testing (ELF-China-Pilot), Testing (ELF-China-Pilot) | eilprojekt A              |                            |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle   |                           |                            |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |                           |                            |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitrai           | um:                        |
| 01.08.2020 bis 28.02.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                            |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                            |
| 69.990,00 EUR  | Prof. Dr. Shao            |                            |

Dieses Pilotprojekt konzentriert sich auf die technischen Barrieren für Endlager der nuklearen Abfälle und wird die THMC-Prozesse in Bentonit (GMZ und MX-80) untersuchen. Die Forschungsaktivitäten werden das Modellierungs- und Laborexperiment zu den physikalischen und chemischen Eigenschaften des chinesischen GMZ-Bentonits sein. Der GMZ-Bentonit wurde von dem Projektpartner Beijing Institute of Uranium Geology (BRIUG) bereitgestellt, und wird in zukünftigen chinesischen Endlagern verwendet. Eines der Projektziele ist die Entwicklung und Kalibrierung der numerischen Modelle, mit denen die physikalischen und chemischen Prozesse vom GMZ-Bentonit simuliert werden können. Dies wird auch durch die im Labor gemessenen Parameter unterstützt. Ein weiteres Ziel des Projekts ist, die Verbindungen mit der chinesischen Wissenschaftsgemeinschaft in der Endlagerforschung herzustellen. Die etablierte Kooperationsbeziehung wird künftige gemeinsame Projekte in den kristallinen Gesteinen im Feldmaßstab ermöglichen. Insbesondere möchten die deutsche Wissenschaftler Zugang zu dem neu errichteten unterirdischen Forschungslabor Beishan bekommen.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Verbundforschungsprojekt besteht aus den folgenden Arbeitspaketen (AP):

AP1: Projektmanagement

AP2: Systemanalyse (Modellierung) AP2.1: TH2M-Prozessmodellentwicklung

AP2.2: RTM-Modellentwicklung (Reactive Transport Processes)

AP3: Experimente

AP4: Synthesis & Education

Das UFZ-Team beschäftigt sich im Berichtszeitraum hauptsächlich mit AP1 und AP2.2.

Zum AP1 Projektmanagement: Mit Unterstützung von BGR (Dr. Hua Shao) und BRIUG (Dr. Ju Wang) wurde ein Projektfortschrittsmeeting erfolgreich durchgeführt. An dem Online-Meeting haben alle sechs beteiligten deutschen Institute und der chinesischer Partner BRIUG teilgenommen. Das BRIUG-Team präsentierte den Fortschritt der Bauarbeiten im Untertagelabor Beishan. Die deutschen Partner stellten ihre Arbeitsfortschritte zu folgenden Themen vor: (1) Die konzeptionellen Ideen der GMZ-Bentoniterosion und Behälterkorrosion, (2) die Laboruntersuchungen der HM-Eigenschaften der kompaktierten Bentonite GMZ im Vergleich mit MX80 und (3) die Modellierungsarbeiten zu THM (TU Freiberg), TH2M (TU Clausthal) und THC (UFZ) Prozessen. BRIUG-Kollegen stellten mehrere Diskrepanzen in den Modellkonfigurationen fest. Es wurde vereinbart, dass die THM- und THC-Modellierer Arbeitstreffen in einer kleineren Gruppe organisieren, um die entsprechende Modellkonfigurationen festzulegen. In dem Online-Meeting haben Dr. Stephan Kaufhold von BGR und Dr. Chun-Liang Zhang von GRS den Eingang von GMZ-Bentonitproben bestätigt und vorläufige experimentelle Analysen der Proben präsentiert. Die vorgestellten Laborergebnisse können für die Modellierungsarbeiten direkt verwendet werden. Die Granitkernproben aus Beishan wurden von BRIUG-Kollegen schon vorbereitet und sind derzeit in Peking gelagert. Von deutscher Seite hat sich die BGR grundsätzlich bereit erklärt, die finanziellen Kosten der internationalen Logistik zu übernehmen. Dr. Hua Shao koordiniert die restlichen Angelegenheiten.

Zum AP2.2 RTM-Modellentwicklung: Im Rahmen einer Diskussion zwischen UFZ und BRIUG über die THC-Modellierung von GMZ-Bentonit präsentierten die Kollegen vom UFZ die aktuelle THC-Modellkonfiguration mit der Software OpenGeoSys. Das Modell konzentriert sich auf den Diffusions- und Sorptionsprozess von Radionukliden in Bentonit. Die Kollegen von BRIUG bekundeten ihr Interesse an den OpenGeoSys-Funktionen und bekundeten ihre Absicht, die Modellierungsergebnisse für die Gestaltung der Beishan-Tunnelstruktur zu verwenden. Die UFZ-Kollegen baten während des Treffens, dass für die spezifischen Simulationen an GMZ-Bentonit die Mineralgruppe des GMZ-Bentonits und die Porenwasserzusammensetzung im Beishan-Granit bereitgestellt werden. Die BRIUG-Kollegen tauschten bestehende chemische Parameter des GMZ-Bentonits aus. Beide Parteien stellten das Fehlen von im Labor gemessenen Radionuklid-Sorptionsdaten von GMZ-Bentonit fest.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr 2021 wird das UFZ-Team an der THC-Modellvorhersage weiterarbeiten. Für das GMZ-Bentonit fehlen aktuell die Radionuklid-Sorptionsdaten. Es wird vereinbart, dass die Daten für den MX-80 Bentonit als Ersatz im numerischen THC-Modell verwendet werden. Damit kann das langfristige Diffusions- und Sorptionsszenario im Endlager modelliert werden. Da die Dimensionen des Metallkanisters und der Tunnelstruktur von chinesischer Seite noch nicht festgelegt wurden, wird das UFZ-Team nach dem Design des Mont-Terri Labors in der Schweiz den numerischen THC-Modellprozess erstellen und simulieren.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:   |                           | Förderkennzeichen:       |
|--|---------------------------|--------------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   |                           | 02 E 11850B              |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                          |
| Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungs                                | sforschung – Pilo         | otprojekt: Reanalysis of |
| BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt B                        |                           |                          |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                          |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1                                     |                           |                          |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                      |
| 01.08.2020 bis 28.02.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                          |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                          |
| 25.000,00 EUR  | Dr. Czaikowski            | i                        |

Das Pilotprojekt ist zur Vorbereitung der internationalen Kooperation mit China im Bereich der Endlagerforschung in einem zukünftigen chinesischen Untertagelabor "URL Beishan" in Granite. Es werden vier Themenbereiche betrachtet: (1) sozial-technische Aspekte; (2) Modellierung; (3) Laboruntersuchung; und (4) Ausbildung. Das ist ein Verbundprojekt mit zahlreicher deutschen und chinesischen Beteiligungspartnern (BGR, GRS, TUBAF, TUC, UFZ, FSU, KIT; BRIUG, TONGI-U). Der Hauptaufgaben des Pilotprojekts sind Modellierung des China-Mock-Up-Experiments und Vorbereitung der Laboruntersuchung zur Bestimmung der THMC-Eigenschaften von GMZ-Bentonit aus China und MX80-Bentonit aus der USA.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Pilotprojekt wird von allen Partnern in fünf Arbeitspaketen durchgeführt:

AP1: Projektmanagement

AP2: Modellierung der THM-Prozesse im Bentonit im China-Mock-Up-Experiment

AP3: Vorbereitung auf Laboruntersuchung zur Bestimmung THMC-Eigenschaften von Bentoniten GMZ und MX80

AP4: Synthese und Ausbildung

AP5: Sozial-technische Forschung

GRS ist an AP3 beteiligt.

Drei Versuchsverfahren sind entwickelt worden, um THM-Eigenschaften vom Bentonit GMZ und MX80 zu untersuchen.

- Die Wasseraufnahmefähigkeit der Bentonite ist durch Messung von Wassergehalten der Proben bei unterschiedlicher Luftfeuchtigkeitswerten ermittelt. Daraus wird die Wasserrückhaltbarkeit mit Hilfe eines Zusammenhangs zwischen Wassergehalt und Saugspannung oder relativer Luftfeuchtigkeit charakterisiert.
- Ein Versuchssystem mit zehn Stahlzellen wurden zusammengebaut und getestet, um Quelldruck, Wasserpermeabilität und Gasdurchbruchdruck bzw. Gaspermeabilität von kompaktierten Bentoniten mit unterschiedlicher Dichten zu ermitteln. Vortests mit zehn BentonitProben sind im Lauf.
- Ein weitere Prüfanlage wurde mit vier Stahlzellen gebaut, um Quellverformung, Wasserpermeabilität, Gastransport in Bentoniten bei unterschiedlichen Spannungen und Temperaturen zu bestimmen.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Messung der Wasseraufnahmefähigkeit von Bentonit GMZ/MX80
- Weiterführung der Messung von Quelldruck, Wasserpermeabilität und Gasdurchbruchdruck von Bentonit GMZ/MX80

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen:        |
|--|---------------------------|---------------------------|
| Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6,                  |                           | 02 E 11850C               |
| 09599 Freiberg   |                           | 02 E 11830C               |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                           |
| Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgung                                 | sforschung – Pi           | lotprojekt: Reanalysis of |
| BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), To                                   | eilprojekt C              |                           |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                           |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1                                     |                           |                           |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitrau           | ım:                       |
| 01.08.2020 bis 28.02.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                           |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                           |
| 89.993,50 EUR  | Prof. Dr. Nagel           |                           |

Das Pilotprojekt konzentriert sich auf die Funktionalität der technischen Barrieren für die Endlagerung von radioaktiven Abfällen und wird dabei die entsprechenden THMC-Prozesse in Bentoniten (GMZ und MX-80) untersuchen. Die Forschungsaktivitäten innerhalb des ersten Jahres werden sich hauptsächlich mit Modellierungsarbeiten befassen, um das grundlegende Verständnis für den Langzeitverschluss in verschiedenen Endlagertypen weiter zu verbessern. Die wichtigsten Ergebnisse werden mit Hilfe moderner Kommunikationsmethoden (VR) synthetisiert. Der Schwerpunkt der Forschungsaktivitäten innerhalb der Pilotphase ist dem BRIUG THM Mock-up Test zur Eignung von GMZ-Bentonit als geotechnische Dichtung für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle gewidmet.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Pilotprojekt wird sich zunächst auf ausgewählte experimentelle Untersuchungen und numerische Modellierung des chinesischen Mock-up-Tests konzentrieren, insbesondere mit der Untersuchung von THM-Prozessen in verschiedenen Bentonit-Barrieresystemen. Die Projektaktivitäten sind in fünf Arbeitspakete gegliedert. Die Hauptteile (WP2 Systemanalyse und WP3 Experimente) sind der kombinierten Modellierung und experimentelle Arbeiten an GMZ- und MX-80-Bentoniten gewidmet.

In diesem Teilvorhaben werden vorrangig Beiträge zur THM Modellierung des China Mock-Up Versuches in WP2 geliefert. Darüber hinaus werden begleitende experimentelle, gesteinsphysikalische Arbeiten an Beishan Granit durchgeführt. Diese dienen als Start- und Anknüpfungspunkte für das Verbundprojekt, das an das Pilotprojekt anschließen wird, und auf THM/C – gekoppelte Prozesse im kristallinen Wirtsgestein fokussiert ist.

# 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Durchführung der THM Simulationen des China-Mock-Up Versuchs wurden Prozessmodelle in OpenGeoSys implementiert und getestet, mit denen anschließend axialsymmetrische Modelle des China Mock-Up Versuchs berechnet wurden. Diese Modelle bilden die im Experiment beobachteten Phänomene grundlegend ab und erfordern in den nächsten Schritten eine Kalibrierung.

Die folgenden Arbeiten wurden im Berichtszeitraum durchgeführt:

- Weiterentwicklung zweier Prozessklassen für nichtisothermen Zweiphasenfluss in deformierbaren porösen Medien in OpenGeoSys, von denen eine auf einer vollständigen Zweiphasenformulierung, die andere auf einer Richards Approximation beruht. Schwerpunkte der Weiterentwicklung im Berichtszeitraum waren die hydraulisch-mechanische Kopplung sowie die Implementierung von Dampfdiffusionsmodellen in Verbindung mit Evaporation und Kondensation des Porenwassers.

- Vollständige Parametrisierung und Berechnung des Versuchs. Auswertung der Ergebnisse hinsichtlich Plausibilität und Phänomenologie. Aufzeigen von Literaturlücken hinsichtlich der Modellparametrisierung. Hierzu wird ein Austausch mit den chinesischen Partnern im zweiten Halbjahr angestrebt.
- Erstellung einer dreidimensionalen Geometrie des Versuchsaufbaus zur Erfassung nicht axialsymmetrischer Effekte (induziert insbesondere durch die Art der Versuchsrandbedingungen). Vernetzung und erste Simulationen. Vergleich der Ergebnisse mit der axialsymmetrischen Geometrie verlief erfolgreich.
- THM und TH<sup>2</sup>M Formulierungen wurden an einfachen Benchmarks erfolgreich verglichen.

Im Rahmen des Kick-Off Meetings des Pilot-Projekts konnte eine erste Kontaktaufnahme der deutschen Projektpartner mit den chinesischen Kollegen (BRIUG) mit dem Ziel erfolgen, Bohrkernproben aus den geologischen Erkundungsbohrungen am Standort Beishan zu erhalten. Im Pilot-Projekt sind erste Laboruntersuchungen an diesem Probematerial an den teilnehmenden Institutionen in Deutschland geplant. Erfreulicherweise stehen die chinesischen Verantwortlichen diesem Plan sehr aufgeschlossen gegenüber und haben ihre Unterstützung zugesagt.

Unter Koordinierung der TUBAF (Dr. Frühwirt) wurden die Bedarfe aller (deutschen) Projektbeteiligten an Bohrkernproben aus Beishan erhoben, strukturiert und gebündelt an die BGR (Dr. Shao) übermittelt. Folgende Gruppen haben Bedarf an Bohrkernproben angemeldet, wobei an den jeweiligen Instituten unterschiedliche Untersuchungsziele verfolgt und Untersuchungsmethoden angewendet werden:

- FSU (Gruppe um Prof. Schäfer)
- BGR (Gruppe um Dr. Shao und Dr. Pollok)
- TUBAF (Gruppe um Dr. Frühwirt)

Auf Basis dieser Bedarfserhebung wurden in Beishan geeignete Bohrkernabschnitte identifiziert, die Kerne entnommen und dokumentiert. Aktuell werden diese für den Transport verpackt. Die weitere Koordinierung der Beschaffung des Probematerials erfolgt unter Federführung der BGR (Dr. Hua Shao für die deutsche Seite) und BRIUG (Dr. Ju Wang für die chinesische Seite). Im Moment sind in erster Linie organisatorische Fragen des Transports, wie z. B. die Auswahl eines geeigneten Unternehmens, Übernahme der Kosten, Fragen des Zolls und der Versicherung, zu klären. Sobald das Probematerial in Deutschland eintrifft, wird es an die drei oben genannten Institutionen verteilt werden, damit dort die geplanten Arbeiten beginnen können.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Folgende Arbeitsschritte sind für die folgenden Berichtsszeiträume geplant:

- Weitere Präzisierung der Randbedingungen sowie Materialparameter im Austausch mit den chinesischen Partnern, um Lücken und Widersprüche in der publizierten Literatur zum Experiment zu schließen.
- Vergleich der Prozessmodellergebnisse verschiedener Modellierteams anhand einfacher repräsentativer Benchmarks.
- Sensitivitätsanalysen am THM Modell sowie Testen alternativer Konstitutivansätze.
- Weiterführung der experimentellen Arbeiten anhand des Probenmaterials aus Beishan.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Die bisherigen Arbeiten sind in internen Berichten für die Modelldokumentation zusammengefasst. Eine Veröffentlichung ist in den folgenden Berichtszeiträumen geplant.

| Zuwendungsempfänger:   |   | Förderkennzeichen:        |  |
|--|---|---------------------------|--|
| Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678                  |   | 02 E 11850D               |  |
| Clausthal-Zellerfeld   |   | 02 E 11630D               |  |
| Vorhabensbezeichnung:  |   |                           |  |
| Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgung                                 | sforschung – Pi   | lotprojekt: Reanalysis of |  |
| BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Te                                   | BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt D |                           |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |   |                           |  |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1                                     |   |                           |  |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitrau   | ım:                       |  |
| 01.08.2020 bis 28.02.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021                               |                           |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:  |                           |  |
| 70.072,00 EUR  | Prof. Dr. Düster  | rloh                      |  |

Übergeordnetes Ziel des Verbundforschungsvorhabens ist es, geotechnische Fragestellungen zur Funktionalität von Abdichtungselementen aus Bentonit für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in einer längerfristigen, vertieften, nachhaltigen und strukturierten Kooperation zwischen Deutschland und China zu bearbeiten. Neben wissenschaftlichen Arbeiten im Bereich laborativer, feldbezogener und numerischer Untersuchungen, sollen durch die Entwicklung und Installation eines Ausbildungs- und Traineeprogrammes Kompetenzen und Erfahrungen im Bereich der Endlagerung radioaktiver Abfälle ausgetauscht werden. Schwerpunkte des hier vom Projektpartner TUC beantragten Pilotprojektes sind (a) numerisch-rechnerische Reanalysen des THM Mock-up Tests von BRIUG mit dem Ziel aufzuzeigen, ob und inwieweit unter Berücksichtigung der im Versuch realisierten THMC-Einwirkungen die dokumentierten Messwerte abgebildet und nachvollzogen werden können und (b) laborative Untersuchungen zur Bestimmung der 2-Phasenfluss-Eigenschaften von Bentonit durchzuführen.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- WP1: Projektmanagement (TUBAF und UFZ)
- WP2: Numerische Reanalyse des BRIUG THM Mock-up Tests
- WP3: Laborative Untersuchungen zum 2-Phasenfluss-Verhalten von Bentonit
- WP4: Projektbezogenes Fortbildungs- und Traineeprogramm für wiss. Mitarbeiter und Studenten
- WP5: Schlussbericht

#### WP2:

Durchführung und Auswertung von numerischen Simulationen zur weiteren Verifikation der Implementierung des Barcelona-Basic-Modells (BBM) in den FTK-Simulator (FTK = FLAC<sup>3D</sup>-TOUGH2-Kopplung) unter Berücksichtigung von H<sup>2</sup>M-gekoppelten Prozessen anhand eines Vergleichs der erhaltenen Simulationsergebnisse mit einer vom LBNL (Lawrence Berkeley National Laboratory) veröffentlichten numerischen Simulation zur Implementierung des Barcelona-Basic-Modells (BBM) in den Simulator TOUGH-FLAC.

Die mit dem FTK-Simulator erhaltenen numerischen Ergebnisse (z. B. Sättigungsgrad, Porendruck und Quelldruck) stimmen sehr gut überein mit den Simulations- und Laborergebnissen des BRIUG.

# WP3:

Kontrolle der Funktionalität der konstruierten Laborversuchsanlage zur Messung von Zweiphasenflusseigenschaften von Bentonit anhand der Durchführung und Auswertung von Test-Laborversuchen an wasservollgesättigten höher-permeablen Dummy-Prüfkörpern zur Messung ihres Kapillardrucks und des zugehörigen Sättigungsgrads unter Zweiphasenflussbedingungen bei Durchströmung mit Stickstoff unter Verwendung von semipermeablen Membranen. Ziel ist die Ableitung einer funktionalen Kapillardruck-Sättigungsgrad-Beziehung für die Dummy-Prüfkörper bei gleichzeitiger Kontrolle der Dichtheit der semipermeablen Membranen.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

#### WP2:

Durchführung von prognostischen numerischen Simulationen der am Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik der TU Clausthal geplanten laborativen Untersuchungen zu den Zweiphasenflusseigenschaften (funktionale Beziehung zwischen Sättigungsgrad und Kapillardruck und funktionale Beziehung zwischen Sättigungsgrad und fluidbezogenen Relativpermeabilitäten) unter Verwendung des FTK-Simulators.

## WP3:

Fortführung der Test-Laborversuche an höher-permeablen Dummy-Prüfkörpern zur vertieften Kontrolle der Funktionalität der konstruierten Laborversuchsanlage und der semipermeablen Membranen zur Messung von Zweiphasenflusseigenschaften (funktionale Beziehung zwischen Sättigungsgrad und Kapillardruck) der Dummy-Prüfkörper.

Test-Laborversuche an Tonstein/Bentonit-Prüfkörpern zur Messung von Zweiphasenflusseigenschaften (funktionale Beziehung zwischen Sättigungsgrad und Kapillardruck) von Tonstein/Bentonit.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |   | Förderkennzeichen:        |
|--|---|---------------------------|
| Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben   | Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben1, 07743 Jena |                           |
| Vorhabensbezeichnung:  |   |                           |
| Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgung   | sforschung – Pi   | lotprojekt: Reanalysis of |
| BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Testing Testing (ELF-China-Pilot), Testing (ELF-China-Pilot) | eilprojekt E  |                           |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle   |   |                           |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |   |                           |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra  | um:                       |
| 01.08.2020 bis 28.02.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021                                       |                           |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:  |                           |
| 15.104,00 EUR  | Prof. Dr. Schäfe  | er                        |

Ein wesentlicher Bestandteil des Multi-Barriere-Systems für die tiefgeologische Entsorgung von hochradioaktiven Abfällen ist die geotechnische Barriere (Bentonit). Im Rahmen des chinesisch-deutschen Pilotprojekts sind Voruntersuchungen zu THMC Prozessen geplant, insbesondere in Bezug auf GMZ-Bentonit im Vergleich zu bereits vorhandenen Daten zu MX-80 Bentonit. Zwei Aspekte werden von FSU in enger Kooperation mit KIT-INE hauptsächlich untersucht:

- Die Rolle von akzessorischen Gemengteilen neben Montmorillonit auf das Erosionsverhalten (Barriere-Integrität) und
- die Wechselwirkung von korrodierenden Kanister-Materialien mit dem GMZ-Bentonit. Basierend auf den beiden Hauptthemen dieser Pilotstudie ist der folgende Arbeitsplan vorgesehen: Charakterisierung und Quantifizierung der akzessorischen Mineralien in GMZ-Bentonit (Mineralogie, Korngrößenverteilung, Reaktivität) und Erosionsexperimente unter glazialen Schmelzwasserbedingungen und Kanister-Korrosionsmaterialanalyse in Präsenz von GMZ-Bentonit. Die Einrichtung der ersten reaktiven Modelle, insbesondere für HMC-Prozesse wird parallel geplant. Beide Aktivitäten sollen in enger Zusammenarbeit mit den chinesischen Forschungsgruppen durchgeführt werden.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Projekt Management

AP2: System Analyse (Modellierung)

AP2.1: TH<sup>2</sup>M Prozesse

AP2.2: Reaktive Transport Prozesse

AP3: Experimente AP3.1: TH<sup>2</sup>M Prozesse

AP3.2: Reaktive Transport Prozesse AP4: Synthese & Ausbildung

AP4.1: Virtuelles URL Konzept

AP4.2: Ausbildungs- und Workshop Programm

AP2.2: Die bisher durchgeführten und weiterhin geplanten Aktivitäten fokussieren sich auf theoretische Arbeiten. Das Manuskript Huber et al. (2021) der Partner KIT-INE und FSU wurde im ersten Halbjahr 2021 im *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* publiziert.

AP3.2: Auf Grund der Schließung der Laborbereiche im Zuge der Corona-Pandemie sind ei-

nige der geplanten präparativen Vor-Arbeiten nicht oder nur zum Teil durchgeführt worden. Die GMZ Materialien mit Bezeichnung GMZ24-200 und GMZ-001 stehen beiden Partnern (KIT-INE und FSU) nun für die Versuchsdurchführung zur Verfügung. Die Aufreinigung der GMZ Proben und Separation des Tonmineralanteils erfolgte und ist abgeschlossen.

Das experimentelle Setup zur Quantifizierung der Bentoniterosion unter glazialen Schmelzwasserbedingungen und dem Einfluss von akzessorischen Gemengteilen wird im Moment mit MX-80 Rohmaterial und Mischungen aus aufgereinigten Na-homoionischen MX-80 Proben (nahezu reiner Montmorillonit) und Zumischung reiner Quarzmehlanteile (10 Gew. %, 20 Gew. %) untersucht (Projekt KOLLORADO-e3). Diese Arbeiten sind experimentell nahezu abgeschlossen. Die im Anschluss geplante Durchführung von Versuchen unter identen Versuchsbedingungen mit den beiden Chargen des GMZ Roh-Materials wurde zurückgestellt und eine systematische Untersuchung

# 4. Geplante Weiterarbeiten

vorgezogen.

AP2.2: Fortführung der theoretischen Arbeiten und geplante Einbindung der μCT/XRM- Daten einer realen Kluft-Geometrie in das Modell von Huber et al. (2021).

des Einflusses der Ca-Konzentration (CCC) der Kontaktlösung an MX-80 und Febex

AP3.2: Durchführung von Bentoniterosions-Experimenten mit den beiden GMZ-Rohmaterialien und der aufgereinigten Tonfraktion unter Zusatz von reinen Quarzmehlanteilen oder einem Ca-Träger (wahrscheinlich im Falle von GMZ Calcit, da dieser auch als natürliches akzessorisches Gemengteil in dem Material vorkommt.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Huber, F.M., Leone, D., Trumm, M., Moreno, L.R., Neretnieks, I., Wenka, A., and Schäfer, T. (2021): Impact of rock fracture geometry on geotechnical barrier integrity – A numerical study. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences 142, 104742

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für                              |                           | 02 E 11850F        |
| Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz   | z 1, 76344 Eg-            | 02 L 110301        |
| genstein-Leopoldshafen   |                           |                    |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |
| Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of |                           |                    |
| BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt F                                |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle         |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:         |                    |
| 01.08.2020 bis 28.02.2022  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 10.270,50 EUR  | Prof. Dr. Gecke           | eis                |

Ein wesentlicher Bestandteil des Multi-Barriere-Systems für die tiefgeologische Entsorgung von hochradioaktiven Abfällen ist die geotechnische Barriere (Bentonit). Im Rahmen des chinesisch-deutschen Pilotprojekts sind Voruntersuchungen zu THMC Prozessen geplant, insbesondere in Bezug auf GMZ-Bentonit im Vergleich zu bereits vorhandenen Daten zu MX-80 Bentonit. Zwei Aspekte werden von KIT-INE in enger Kooperation mit FSU hauptsächlich untersucht:

- Die Rolle von akzessorischen Gemengeteilen neben Montmorillonit auf das Erosionsverhalten (Barriere-Integrität) und
- Die Wechselwirkung von korrodierenden Kanister-Materialien mit dem GMZ-Bentonit. Basierend auf den beiden Hauptthemen dieser Pilotstudie ist der folgende Arbeitsplan vorgesehen: Charakterisierung und Quantifizierung der akzessorischen Mineralien in GMZ-Bentonit (Mineralogie, Korngrößenverteilung, Reaktivität) und Erosionsexperimente unter glazialen Schmelzwasserbedingungen und Kanister-Korrosionsmaterialanalyse in Präsenz von GMZ-Bentonit. Die Einrichtung der ersten reaktiven Modelle, insbesondere für HMC-Prozesse wird parallel geplant. Beide Aktivitäten sollen in enger Zusammenarbeit mit den chinesischen For-

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Projekt Management

AP2: System Analyse (Modellierung)

schungsgruppen durchgeführt werden.

AP2.1: TH<sup>2</sup>M Prozesse

AP2.2: Reaktive Transport Prozesse

AP3: Experimente AP3.1: TH<sup>2</sup>M Prozesse

AP3.2: Reaktive Transport Prozesse AP4: Synthese & Ausbildung AP4.1: Virtuelles URL Konzept

AP4.2: Ausbildungs- und Workshop Programm

#### AP3.2:

Für KIT-INE wurde im Frühjahr 2021durch FSU GMZ-Bentonitmaterial zur Verfügung gestellt, welches nun für Experimente eingesetzt wird, die die Radionuklidmigration an der Magnetit/GMZ-Bentonit Grenzfläche simulieren sollen. Die Experimente finden parallel zu gleichartigen Tests mit MX-80 Bentonit statt, die im Rahmen des iCROSS Vorhabens durchgeführt werden. GMZ Bentonit wurde in eine Diffusionszelle eingebracht, mit Magnetit unterschichtet. Die Probe wird derzeit mit einer simulierten Porenwasserlösung gesättigt. Ziel ist es, den Einfluss von Korrosionsprodukten und Tonalterationsphasen auf die Radionuklidmigration zu quantifizieren und insbesondere Unterschiede des Verhaltens beider Bentonitarten (MX-80, GMZ) herauszuarbeiten.

Komplementär zu den Untersuchungen, die bei FSU mit einem Plexiglas Aufbau zur Bentoniterosion durchgeführt werden, finden Experimente bei KIT-INE mit einem speziellen Reaktoraufbau statt. Der Aufbau ist in Bouby et al., (Appl. Clay Sci., 2020, 198, 105797) beschrieben und besteht aus einer Zelle, in der ein GMZ Bentonitpellet zwischen eine Platte aus PEEK und eine Edelstahlfritte mit einer Porenweite von 20 µm eingebracht wurde. Die poröse Fritte simuliert eine Kluft, die mit porösem Kluftfüllmaterial gefüllt ist. GMZ-Pelletproben wurden vorbereitet und Erosionsexperimente begonnen. Auch hier finden parallel Experimente mit MX-80 Bentonit (im Rahmen des KOLLORADO-e3 Vorhabens) statt, in denen der Bentonit mit unterschiedliche Mengen an akzessorischen Mineralphasen angereichert wurde.

Insgesamt finden die Experimente aufgrund von Personalwechsel gegenüber dem ursprünglichen Zeitplan verzögert statt.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Auf Grund der Schließung der Laborbereiche im Zuge der Corona-Pandemie sind einige der geplanten präparativen Vor-Arbeiten nicht durchgeführt worden.

- AP2.2: Fortführung der theoretischen Arbeiten und speziell Publikation des Manuskripts Huber et al. (2021, in review).
- AP3.2: Ein experimenteller Aufbau für Untersuchungen, die die Wechselwirkung eines korrodierenden Behälters mit MX-80 Bentonit simulieren sollen, wurde in den KIT-INE Labors im Rahmen des iCROSS Vorhabens realisiert. Im Laufe des Jahres sind entsprechende Experimente mit GMZ Bentonit (nach sorgfältiger Charakterisierung) geplant. Ziel ist es, den Einfluss von Korrosionsprodukten und Tonalterationsphasen auf die Radionuklidmigration zu quantifizieren. Dazu werden die in KIT-INE und FSU vorhandenen komplementären Untersuchungsmethoden (z. B. KIT-INE: μ-XAS, FSU: XRM) Einsatz finden. Die Ergebnisse der Experimente werden mit den Laboruntersuchungen (iCROSS) und den URL Experimenten (MACOTE) an MX-80 verglichen und ggfs. Besonderheiten im Verhalten des GMZ Materials herausgestellt.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Huber, F. M., D. Leone, M. Trumm, L. Moreno, I. Neretnieks, A. Wenka, T. Schäfer (2021): Impact of fracture geometry on bentonite erosion - a numerical study, Int. J Rock Mech. Min.; in review

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen:         |
|--|---------------------------|----------------------------|
| Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21                              | , 55122 Mainz             | 02 E 11860A                |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                            |
| Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückha                                 | altung an Zemen           | talterationsphasen - Phase |
| II (GRaZ II), Teilprojekt A  |                           |                            |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                            |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1                                     |                           |                            |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitrai           | um:                        |
| 01.10.2020 bis 30.09.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                            |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                            |
| 415.075,00 EUR   | Prof. Dr. Reich           |                            |

Das Thema des Forschungsvorhabens ist die Rückhaltung von Actiniden im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in Tonsteinformationen Norddeutschlands gemäß dem Standortmodell NORD. Für den Sicherheitsnachweis eines solchen Endlagers gibt es Wissenslücken zum Einfluss von gelöstem Eisen, das bei der Korrosion der Einlagerungsbehälter freigesetzt wird sowie von organischen Liganden, die aus der Beton- bzw. Zementkorrosion der technischen Barriere resultieren. Eine Besonderheit des Standortmodells NORD besteht in der mittleren bis hohen Ionenstärke der Formationswässer des Tongesteins. Deshalb wird der Einfluss von Eisen sowie der organischen Liganden auf die Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken quantifiziert werden. Dazu werden die Prozesse Sorption, Diffusion, Komplexierung und Redoxtransformation mit experimentellen Methoden studiert, auf molekularer Ebene aufgeklärt und mit thermodynamischen Modellen beschrieben. Auf der Basis der in diesem Projekt und dem vorhergehenden Verbundvorhaben GRaZ I erzielten Ergebnisse soll kritisch bewertet werden, in wieweit vorhandene Befunde für Systeme niedriger Ionenstärke auf die Bedingungen mittlerer bis hoher Ionenstärke gemäß dem Standortmodell NORD anwendbar sind. Dazu werden auch die im Rahmen des europäischen Projektes CORI erzielten Ergebnisse herangezogen. Im Rahmen des Verbundprojekts wird schwerpunktmäßig mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, dem Karlsruher Institut für Technologie, der Universität des Saarlandes, der Universität Potsdam und der TU München zusammengearbeitet.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Einflusses von Fe(II) auf die Rückhaltung von Actiniden an Zementphasen bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- Einflusses von niedermolekularen organischen Liganden auf die Rückhaltung von Actiniden an Zementphasen bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- Komplexierung von Actiniden mit ausgewählten organischen Referenzliganden

Im Rahmen der Untersuchungen zum Einfluss von Gluconat (GLU) auf die Rückhaltung vierwertiger Actinide (An) an Zementstein (HCP) wurden zunächst die Batchexperimente zu den binären Systemen HCP/GLU und HCP/An abgeschlossen. Die Sorptionsversuche im System HCP/GLU wurden mit  $^{14}$ C-GLU und Suspensionen von HCP (< 63 µm, w/z = 0,5) in synthetischem Zementporenwasser (ACW) auf Basis der verdünnten Gipshutlösung (VGL) bei pH 12,6 unter Argonatmosphäre durchgeführt. Bei einer Gesamtkonzentration von 1 × 10<sup>-2</sup> M GLU wurde unter Variation des Fest-flüssig-Verhältnisses (S/L) im Bereich von 1 bis 20 g HCP/L ein konstanter Verteilungskoeffizient  $\log R_d(L/kg) = 2,0 \pm 0,1$  erhalten. Bei Erniedrigung der GLU-Konzentration steigt die Sorption des organischen Liganden an HCP an. So wurde bei S/L = 5 g HCP/L im Bereich von  $10^{-2}$  bis  $10^{-7}$  M GLU eine systematische Zunahme des  $\log R_d(L/kg)$  von 2,0 auf 3,7 beobachtet.

Das binäre System HCP/An wurde bei S/L = 0,1 g HCP/L mit dem redoxstabilen Thorium(IV) im Konzentrationsbereich von  $10^{-6}$  bis  $10^{-12}$  M  $^{232,234}$ Th(IV) in VGL-ACW bei pH 12,5 unter Argonatmosphäre studiert. Dabei wurde ein lineares Sorptionsverhalten von Th(IV) beobachtet und  $\log R_d(L/kg) = 5.8 \pm 0.2$  ermittelt.

Zur Durchführung von Batchversuchen zur Sorption redoxsensitiver An an HCP in Gegenwart von gelöstem Fe(II) unter definierten Redoxbedingungen wurde eine neue elektrochemische Zelle aus PEEK angefertigt und mit der Charakterisierung des speziellen experimentellen Aufbaus begonnen.

Die Herstellung von mehreren filterfreien Diffusionszellen für Diffusionsexperimente mit An(IV) verzögerte sich Corona-bedingt um einen Monat. Entsprechend später erfolgt der Einbau der Zementsteinzylinder (w/z = 0.5, Dicke = 5 mm, Ø = 25 mm). Unmittelbar danach beginnt die Charakterisierung der Zementproben durch die Bestimmung von Diffusionsparametern für tritiiertes Wasser (HTO) mit ACW-VGL als mobile Phase.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- Batchexperimente zur Sorption von Pu(IV) und dem redoxstabilen Analogon Th(IV) an HCP in Gegenwart von gelöstem Fe(II) bzw. GLU unter hyperalkalinen und anaeroben Bedingungen in ACW-VGL
- Abschluss der Charakterisierung der Diffusionsproben mit HTO und Beginn der Diffusionsexperimente mit An(IV) in HCP mit ACW-VGL unter anaeroben Bedingungen

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen:         |
|--|---------------------------|----------------------------|
| Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr.                  |                           | 02 E 11860B                |
| 400, 01328 Dresden   |                           | 02 E 11000B                |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                            |
| Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückha                                 | altung an Zemen           | talterationsphasen - Phase |
| II (GRaZ II), Teilprojekt B  |                           |                            |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                            |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1                                     |                           |                            |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitrai           | um:                        |
| 01.10.2020 bis 30.09.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                            |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                            |
| 426.606,00 EUR   | Dr. Schmeide              |                            |

Schwerpunktmäßig soll der Einfluss von Eisen sowie von organischen Liganden auf die Freisetzung bzw. Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide (U, Cm, Pu) in Systemen mit Zementphasen, Tonmineralphasen und Ca-Bentonit als Puffermaterial in hyperalkalinen Medien mittlerer bis hoher Ionenstärke untersucht werden. Hierfür werden Batch-Sorptionsexperimente und spektroskopische Methoden kombiniert. Im Mittelpunkt der Untersuchungen stehen niedere Oxidationsstufen der Radionuklide. Dabei soll der Einfluss von Fe(II) bzw. von Fe(III) bezüglich konkurrierender Effekte auf die Rückhaltung bzw. Komplexierung von Actiniden identifiziert werden. Weiterhin soll der Einfluss von Fe(II) auf die Redoxstabilität von Actiniden in höheren Oxidationsstufen speziell für U und Pu untersucht werden. Die Stabilität Actinid-dotierter Phasen in komplex zusammengesetzten Lösungen erhöhter Ionenstärke wird untersucht. Spektroskopische Untersuchungen der binären Uran(VI,IV)-Ligand-Systeme werden durchgeführt, um molekulare Strukturen und Komplexbildungskonstanten im zementrelevanten pH-Bereich zu ermitteln. Die geplanten Batchsorptions- und Komplexierungsexperimente in Kombination mit sich jeweils ergänzenden spektroskopischen Methoden liefern komplementäre Informationen (sowohl zu chemischen Alterationsprozessen als auch zu strukturellen Veränderungen), die zu einem detaillierten mechanistischen Verständnis der Radionuklid-Immobilisierung unter Endlagerbedingungen beitragen. 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

- Uran-Rückhaltung an C-S-H-Phasen unter reduzierenden Bedingungen Einfluss niedermolekularer organischer Liganden
- Curium(III)-Rückhaltung an C-(A-)S-H-Phasen Einfluss von Fe(III)
- Plutonium-Rückhaltung an C-(A-)S-H-Phasen Einfluss von Fe(II), Fe(III)
- Uran-Rückhaltung an Ca-Bentonit unter reduzierenden Bedingungen Einfluss niedermolekularer organischer Liganden
- Plutonium-Rückhaltung an Ca-Bentonit unter reduzierenden Bedingungen Einfluss von Fe(II)
- Uran(VI)- und Uran(IV)-Komplexierung mit kleinen organischen Molekülen
- Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung
- Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis

- Im pH-Bereich von pH 9 bis 12 ändert sich die Speziation der (ternären) Uranyl(VI)–Citrat–Hydroxo-Komplexe von polynuklear zu mononuklear, analog zu den (binären) anorganischen U(VI)-Hydrolysespezies. Während der [(UO<sub>2</sub>)<sub>3</sub>(μ<sub>3</sub>-O)(μ<sub>2</sub>-OH)(Cit<sub>-H</sub>)<sub>2</sub>]<sup>5-</sup> allmählich zerfällt, bildet sich (mindestens) eine mononukleare ternäre Spezies. Aus der Kombination von NMR-mit UV-Vis- und IR-Spektroskopie wird geschlussfolgert, dass es sich um UO<sub>2</sub>Cit(OH)<sup>2-</sup> oder/und UO<sub>2</sub>Cit(OH)<sub>2</sub><sup>3-</sup> handelt. Thermodynamische Berechnungen für pH 2 bis 9 zeigen, dass Citrat nicht mit anorganischen Liganden (z. B. Phosphat oder Carbonat) konkurrieren kann, wenn die U(VI) Konzentration im Bereich um 10<sup>-7</sup> M liegt, Citrat jedoch an Einfluss gewinnt, wenn sie etwa 5×10<sup>-5</sup> M überschreitet.
- Erhaltene Komplexbildungskonstanten in Abhängigkeit von der Temperatur (mitsamt Bildungsenthalpien und -entropien) erlauben folgende verallgemeinerbare Aussagen. Mit steigender Temperatur erhöht sich die Komplexstabilität die Bildung ist endotherm; die thermodynamische Triebkraft zur Bildung der Komplexe ist die Erhöhung der Entropie (*T*•Δ*S*-Term), wahrscheinlich infolge Libration der die Einzel-Ionen (Uranyl, Citrat) hydratisierenden Wassermoleküle.
- Die Bestimmung von (temperaturabhängigen) Stabilitätskonstanten der mono-nuklearen ternären Spezies steht noch aus.
- Die synthetisierten Uran(VI)-haltigen C-A-S-H- und Tobermorit-Phasen (Ca/Si: 0.8, 1.2, 1.6; Al/Si: 0, 0.06, 0.18) wurden umfassend mittels <sup>27</sup>Al und <sup>29</sup>Si MAS NMR, XRD und ICP-MS charakterisiert. Der U(VI)-Bindungsmechanismus wurde mittels Lumineszenzspektroskopie (TRLFS) und NMR charakterisiert. Der Vergleich mit zuvor untersuchten U(VI)-dotierten C-S-H-Phasen ermöglicht Rückschlüsse zum Einfluss von Al auf die Struktur der Zementphasen und deren Rückhaltevermögen gegenüber U(VI). Durch Anwendung verschiedener Synthesetemperaturen (25, 100, 200 °C) kann zusätzlich der Einfluss der Temperatur auf Struktur und U(VI)-Rückhaltevermögen der Al-haltigen Zementphasen identifiziert werden. Gegenwärtig wird die Stabilität der U(VI)-dotierten Zementphasen bei erhöhten Ionenstärken untersucht.
- Mit vergleichbaren Untersuchungen zur Eu(III)/Cm(III)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen wurde begonnen.
- Mit Batch-Sorptionsuntersuchungen zum Einfluss von Citrat auf die U(VI)-Rückhaltung durch Ca-Bentonit bei neutralen bis hyperalkalinen pH Bedingungen wurde begonnen. Ziel ist die Bewertung des Einflusses von Citrat im Vergleich zu bereits durchgeführten Untersuchungen mit ISA.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Umfassende Bewertung der U(VI)-Retention an Tonmineralen und C-A-S-H-Phasen bei erhöhten Ionenstärken. Bestimmung der molekularen Strukturen der mononuklearen ternären Uranyl(VI)-Citrat-Hydroxo-Komplexe.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kretzschmar, J., Tsushima, S., Lucks, C., Jäckel, E., Meyer, R., Steudtner, R., Müller, K., Rossberg, A., Schmeide, K., Brendler, V.: Dimeric and Trimeric Uranyl(VI)–Citrate Complexes in Aqueous Solution. Inorganic Chemistry 60, 7998-8010 (2021)

Stockmann, M., Fritsch, K., Bok, F., Marques Fernandes, M., Baeyens, B., Steudtner, R., Müller, K., Nebelung, C., Brendler, V., Stumpf, T., Schmeide, K.: Towards a robust and comprehensive model for U(VI) sorption onto montmorillonite: Batch sorption and spectroscopic studies as function of ionic strength. J. Colloid Interf. Sci. (eingereicht)

| Zuwendungsempfänger:   |  | Förderkennzeichen: |  |
|--|--|--------------------|--|
| Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für                      |  | 02 E 11860C        |  |
| Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz                                 | z 1, 76344 Eg-   | 02 E 11000C        |  |
| genstein-Leopoldshafen   |  |                    |  |
| Vorhabensbezeichnung:  |  |                    |  |
| Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückha                                 | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase |                    |  |
| II (GRaZ II), Teilprojekt C  |  |                    |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |  |                    |  |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1                                     |  |                    |  |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra   | um:                |  |
| 01.10.2020 bis 30.09.2023  | 01.01.2021 bis   | 30.06.2021         |  |
|  |  |                    |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:   |                    |  |
| 411.017,50 EUR   | Dr. Altmaier   |                    |  |

Das Thema des Forschungsvorhabens ist die Rückhaltung von Radionukliden (Actiniden) im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in Tonsteinformationen Norddeutschlands gemäß dem Standortmodell NORD. Für den Sicherheitsnachweis eines solchen Endlagers gibt es Wissenslücken, etwa zum Einfluss von organischen und silicatischen Liganden, die aus der Beton- bzw. Zementkorrosion der technischen Barriere resultieren können. Der Einfluss der organischen und silicatischen Liganden auf die Radionuklidrückhaltung soll an Zementkorrosionsphasen und dem Bentonitpuffer unter hyperalkalinen Bedingungen insbesondere bei mittleren bis hohen Ionenstärken quantifiziert werden. Dazu werden die Prozesse Sorption, Komplexierung, Redoxtransformation und Löslichkeit mit experimentellen und ggf. quantenchemischen Methoden studiert, auf molekularer Ebene aufgeklärt und mit thermodynamischen Modellen beschrieben. Auf der Basis der erzielten Ergebnisse soll kritisch bewertet werden, in wieweit vorhandene Befunde für Systeme niedriger Ionenstärke auf die Bedingungen mittlerer bis hoher Ionenstärke gemäß dem Standortmodell NORD anwendbar sind.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Arbeiten von KIT-INE im Rahmen von GRaZ II gliedern sich in folgende Arbeitspakete:

- AP1: Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen und Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken.
- AP2: Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silicatischen Liganden.
- AP3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung.
- AP4: Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis.

- AP1: Es wurden im Berichtszeitraum mehrere CSH-Phasen mit verschiedenen Ca/Si-Verhältnissen und mit zwei unterschiedlichen Fest/Flüssig-Verhältnissen (1 g/L; 20 g/L) synthetisiert. Die CSH-Phasen wurden mittels XRD, ICP-MS und TOC charakterisiert, und eine gute Reinheit der Festphasen nachgewiesen. Der verwendete MX-80 Bentonit wurde mittels BET-Messung, FTIR und XRD charakterisiert. Unter Verwendung dieser Festphasen wurden erste Batchversuch zur Sorption von Oxalat und EDTA in NaClund CaCl2-haltiger Lösung (in beiden Fällen bei Im = 1.0) durchgeführt, mit dem Ziel sowohl die Sorption der organischen Liganden, als auch den kompetitiven Effekt der Ca²+-Ionen auf diesen Prozess zu quantifizieren. Erste Ergebnisse zeigen im NaCl-System eine Sorption beider organischen Liganden unter bestimmten pH-Bedingungen. Im CaCl2-System ist eine allgemeine, starke Abnahme der Oxalatkonzentration in Lösung zu beobachten, was wahrscheinlich auf die Ausfällung von festem CaOxs zurückzuführen ist. EDTA zeigt im CaCl2-System über den gesamten untersuchten pH-Bereich keine Sorption an den Festphasen.
- AP2: Die Doktorandenstelle in AP2 konnte aufgrund mangelnder geeigneter Bewerber/innen im Berichtzeitraum nicht besetzt werden.
- AP3: Organisation und Teilnahme von Frau Aline Thumm am internen Online-Doktorandenseminar der im GraZ II-Projekt arbeitenden Doktoranden der jeweiligen Verbundpartner.
- AP4: Es sind keine Aktivitäten in frühen Projektphasen geplant.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Die synthetisierten CSH-Phasen werden zusätzlich mittels Raman- und FTIR-Spektroskopie charakterisiert sowie die BET-Oberfläche bestimmt. Beginn der Batchversuche zur Sorption von Eu(III) an CSH-Phasen und MX80-Bentonit in den ternären Systemen Eu(III)/Organik/Festphase bei unterschiedlichen Ionenstärken von NaCl und CaClh. Fortlaufende Beprobung der verschiedenen experimentellen Systeme.
- AP2: KIT-INE beantragt im Juli 2021 eine Umwidmung der ausgeschriebenen Doktorandenstelle in eine PostDoc Stelle. Nach Abschluss des Stellenvergabeverfahrens erfolgt die Bearbeitung in AP2 entsprechend der Planung im Projektantrag.
- AP3: Das monatliche interne Online-Seminar für die Doktorand/innen in GRaZ II wird fortgeführt und entsprechende inhaltliche Beiträge von KIT-INE vorbereitet.
- AP4: Es sind keine Aktivitäten in frühen Projektphasen geplant.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarbrücken                                  |                           | 02 E 11860D        |
| Vorhabensbezeichnung:  | _                         |                    |
| Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase |                           |                    |
| II (GRaZ II), Teilprojekt D  |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle         |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.01.2021 bis 30.09.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 549.256,50 EUR   | Dr. Kautenburg            | ger                |

Basierend auf dem Endlagerkonzept NORD innerhalb des FuE-Vorhabens AnSichT sollen im beabsichtigten FuE-Vorhaben relevante Fragestellungen im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse behandelt werden, die sich insbesondere auf ein mögliches Endlager im norddeutschen Tonstein konzentrieren. Hierbei sollen schwerpunktmäßig solche Parameter untersucht werden, die die geochemische Radionuklidrückhaltung an Zement und Zementalterationsphasen auch in Anwesenheit von Fe(II)/Fe(III) beeinflussen. Es sollen sowohl Immobilisierungsals auch Remobilisierungsprozesse in Betracht gezogen werden. Als endlagerrelevante Elemente werden U(VI) als Kernbrennstoff bzw. Mo(VI) als ein mögliches homologes Element, Eu(III) als Stellvertreter für die dreiwertigen Actiniden sowie Cs(I), Sr(II), Pd(II), Sm(III), Zr(IV) oder Ru(IV) als mögliche Abbau- bzw. Spaltprodukte, als Strukturteile (z. B. Hüllrohre und Kokillen) oder als nicht radioaktive homologe Stellvertreter für vierwertige Radionuklide als Einzelelemente, aber insbesondere als Elementgemisch ("WASTe Cocktail") untersucht werden.

Zu Projektbeginn werden Zementalterationsphasen als solche und zusammen mit organischen Zementzusätzen unter dem Einfluss von hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen untersucht. Insbesondere werden Calcium-Silikat-Hydratphasen (C-S-H-Phasen) ohne bzw. mit typischen Zementzusätzen, wie beispielsweise 2-Phosphono-butan-1,2,4-tricarbonsäure, kurz PBTC, analysiert. Zu diesen Arbeiten gehören die Charakterisierung der Festphasen sowie die Bestimmung der Rückhaltung ausgewählter Elemente, einzeln und im WASTe Cocktail an C-S-H-Phasen mit Hilfe von Batch-Versuchen bzw. Miniatur-Säulen-Experimenten (MSE). Im weiteren Verlauf der Arbeiten soll nicht nur die Reversibilität der Immobilisierung, sondern auch der Einfluss von Zementzusatzstoffen sowie die Anwesenheit von Fe(II)/Fe(III) und möglichen Konkurrenzkationen untersucht werden. Weiterhin ist die Herstellung von Metall-dotierten C-S-H-Phasen und die Untersuchung der Fixierung und Remobilisierung der eingebauten Metalle durch Fe(II)/Fe(III) und möglichen Konkurrenzkationen unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen geplant.

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

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Untersuchungen zur Retention von endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen (WASTe Cocktail) an Korrosionsprodukten von Stahlbeton und Zementalterationsphasen unter dem Einfluss von hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP2: Untersuchungen zur Retention von ausgewählten endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen an Festphasen unter dem Einfluss von Zementzusätzen unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP3: Untersuchungen zur Fixierung und Remobilisierung von endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen aus dotierten Festphasen auch unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP4: Untersuchung zur Remobilisierungskinetik eingebauter Radionuklide aus dotierten Festphasen durch Konkurrenzkationen

Im Untersuchungszeitraum wurden C-S-H-Phasen als solche und C-S-H-Phasen mit dem Langzeitverzögerer 2-Phosphono-butan-1,2,4-tricarbonsäure (PBTC) als Zementzusatzstoff hergestellt. Hierfür wurde in einer Glovebox unter Ar-Atmosphäre eine Suspension aus CaO, SiO2 und Reinstwasser erzeugt, um C-S-H-Phasen mit einem CaO: SiO<sub>2</sub> (C:S)-Molverhältnis von 1,08 zu generieren. Das Verhältnis von C:S 1,08 wurde gewählt, um eine Alteration der Hydratphasen zu simulieren. Die verwendeten C-S-H-Phasen mit PBTC wurden analog zu den C-S-H-Phasen ohne PBTC hergestellt, jedoch wurde dem Reinstwasser ein Anteil von 2% PBTC vor der Herstellung der Suspension unter Ar-Atmosphäre zugeben. Zur Equilibrierung wurden die Suspensionen für 28 Tage unter Ar-Atmosphäre mit einem Magnetrührer gemischt. Nach 28 Tagen wurde das CaO - SiO<sub>2</sub> - Reinstwasser Gemisch bei 10.000 U min<sup>-1</sup> (12.948 g) für 30 min zentrifugiert. Der komplette Überstand wurde in der Glovebox unter Ar-Atmosphäre entnommen und die C-S-H-Phasen wurden im Exsikkator gelagert, bis keine Restfeuchte mehr vorhanden war und die Feststoffe zu Versuchszwecken genutzt werden konnten. Im Anschluss wurden die selbst hergestellten C-S-H-Phasen, die C-S-H-Phasen, denen bereits bei der Herstellung PBTC zugegeben wurde sowie drei weitere kommerziell erhältliche C-S-H-Phasen namens Circolit (Verhältnis von C:S 1,02), Circomorph (Verhältnis von C:S unbekannt) und Circosil (Verhältnis von C:S 0,60), mittels Thermogravimetrie (TG) gekoppelt an die Infrarot(IR)-Spektroskopie (TG-IR), Röntgenbeugung (XRD) und Elementar-Analyse (C-H-N) charakterisiert. Die Charakterisierung erfolgte unmittelbar nach der Entnahme aus dem Exsikkator sowie nach 30 min, 1 h, 4 h, 24 h und 7 d an Luft, um Veränderungen der Zusammensetzung der C-S-H-Phasen im Laufe der Zeit bestimmen zu können. Die Ergebnisse der TG-Messungen zeigten in allen Proben einen ersten Gesamtmassenverlust von 7-20 % im Bereich von 30-400 °C, welcher der Verdampfung von Porenund Kapillarwasser und der Dehydratisierung von C-S-H-Phasen entspricht. Einen zweiten Gesamtmassenverlust von 5-14 % konnte zwischen 300-1000 °C bestimmt werden. Dieser wird dem Verlust von CO<sub>2</sub> aus CaCO<sub>3</sub> zugeschrieben, welches aufgrund einer erfolgten Oberflächencarbonatisierung der C-S-H-Phasen vorhanden sein könnte. Durch die Kopplung der TG-IR war es möglich, Carbonat den jeweiligen Wellenzahlen zuzuordnen, womit die im Vorfeld vermutete geringe Carbonatisierung der C-S-H-Phasen bestätigt wurde. Den geringsten Anteil an CaCO3 enthalten laut den Ergebnissen der TG-IR Messungen die industriell hergestellten C-S-H-Phasen Circolit und Circosil. Eine relevante Zunahme des CaCO<sub>3</sub> Gehalts konnte bei keiner der untersuchten Proben während des Untersuchungszeitraums von 7 d mittels TG-IR festgestellt werden.

Auch die Messungen des Wasserstoff- und Kohlenstoffgehaltes mittels C-H-N-Analyse ergaben keine wesentlichen Änderungen in der Zusammensetzung im Laufe der Zeit. Der Kohlenstoffgehalt der selbst hergestellten C-S-H-Phasen sowie der Circolit und Circosil Proben lag jedoch in den meisten Fällen unterhalb der Bestimmungsgrenze. Die C-S-H-Phasen, denen bei der Herstellung PBTC zugegeben wurde, zeigten einen erhöhten Kohlenstoffgehalt von 3,7 %. Der Grund dafür ist jedoch der Kohlenstoffgehalt von PBTC selbst.

Die XRD-Messungen ergaben, dass die industriell hergestellten C-S-H-Phasen ein weitestgehend stationäres Gleichgewicht über den gesamten Zeitraum aufweisen. Im Gegensatz dazu liefern erste XRD Ergebnisse der selbst hergestellten C-S-H-Phasen und derer mit PBTC, dass es zu einer Veränderung der Zusammensetzung der C-S-H-Phasen über 7 d kommt. Eine vorläufige Auswertung der Beugungsdaten ergab, dass es sich bei den Circolit Proben um Xonotlit (triklin) und bei Circosil zu ca. 90 % um Tobermorit und bei 10 % um Quarz handelt. Für Circomorph konnte gezeigt werden, dass es sich entgegen der Annahme des Herstellers nicht um amorphe C-S-H-Phasen handelt.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Untersuchungszeitraum soll die Auswertung der XRD Daten der selbst hergestellten C-S-H-Phasen (mit und ohne PBTC) und von Circomorph abgeschlossen und in diesem Zusammenhang deren Zusammensetzung bestimmt werden. Des Weiteren soll das Auslaugverhalten der fünf verschiedenen Festphasen untersucht werden. Der zeitabhängige Rückhalt eines endlagerrelevanten Elementgemischs (Waste-Cocktail) an ausgewählten C-S-H-Phasen soll bei niedrigen und hohen Ionenstärken (0,1 M NaCl und 2,55 M verdünnte Gipshutlösung, VGL) bestimmt werden. Alle Experimente werden im hyperalkalinen pH-Bereich (10-13) durchgeführt.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

K. Brix, S. Baur, A. Haben, R. Kautenburger: Building the bridge between U(VI) and Ca-bentonite – Influence of concentration, ionic strength, pH, clay composition and competing ions, Chemosphere. (2021) 131445. doi:10.1016/j.chemosphere.2021.131445

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München                            |                           | 02 E 11860E        |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |
| Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase |                           |                    |
| II (GRaZ II), Teilprojekt E  |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle         |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.10.2020 bis 30.09.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 523.530,00 EUR   | Dr. Krüger                |                    |

- Quantenmechanische Modellierung der Sorption von Actinoiden und Eisen an C-S-H-Phasen
- Quantenmechanische Modellierung der Komplexierung von Actinoiden in basischen Lösungen

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

AP1: Sorption an C-S-H-Phasen

AP2: Komplexierung von Actinoiden

AP3: Unterstützung spektroskopischer Experimente

AP1 umfasst periodische Modelle von C-S-H-Festkörpern und -Oberflächen und die Untersuchungen der Wechselwirkung von Actinoiden mit diesen. Weiterhin wird die Sorption von Eisen und ihre Konkurrenz mit Actinoiden untersucht.

In AP2 werden Silikatkomplexe sowie Komplexe mit Lösungskationen der Actinoiden in wässriger Lösung untersucht.

AP3 ist der Unterstützung der Interpretation spektroskopischer Experimente im Verbund durch entsprechende quantenmechanische Modellierungen im Bedarfsfall gewidmet.

# 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1: Modelle; AP1.3: Sorption an (001)-Oberfläche; AP1.5: Sorption und Konkurrenz Eisen; AP2.3: Ternäre Komplexe mit Lösungskationen.

Methodische Arbeiten zu Tobermoritmodellen von C-S-H-Phasen (AP1.1) befassten sich mit dem Austausch von Protonen gegen Na<sup>+</sup> bei niedrigen C/S-Verhältnissen (C/S = 0.67). Für ein einzelnes Na-Ion wurden verschiedene schicht- und kettenverbrückende Plätze gefunden. Na<sup>+</sup> tendiert in der Zwischenschicht zu 5-facher Koordination und zeigt Bindungslängen zu Gerüstsauerstoffatomen von vergleichbarer Länge wie zu Wasserliganden. Die Austauschenergie gegen ein Proton ist mit um die 30 kJ/mol leicht endotherm.

Im Rahmen der Untersuchung des Sorptionsmechanismus von Actinoiden an C-S-H-Phasen wurden Modellierungen der Adsorption von U(IV) an der (001)-Oberfläche von Tobermoritmodellen fortgeführt und auf Cm(III) erweitert (AP1.3). Für U(IV) wurden für C/S = 0.67 und 1 ein bevorzugter monodentater, ein tridentat kettenverbrückender sowie ein Platz an einem Silikatkettendefekt gefunden. Ein bidentater Platz ergab sich bisher nur für C/S = 0.67. U(IV)koordiniert 6- bis 7-fach, wie in der Zwischenschicht, mit 2-3 OH-Liganden bei niedrigem C/S und 3-5 OH-Liganden für C/S = 1. Mittlere U-O-Bindungslängen für eine Koordinationszahl (CN) von 6 stimmen gut mit Experimenten zu anderen An(IV)-Ionen überein, die jedoch eine CN von 8 nahelegen. Die Anzahlen der kurzen U-Si- und U-Ca-Abstände liegen unter gemessenen Werten für andere An(IV)-Ionen, was gegen einen Beitrag der Adsorption zum Sorptionsmechanismus spricht. Die Adsorption von Cm(III) an der (001)-Oberfläche eines Tobermoritmodells wurde bisher für C/S = 1 modelliert. Gefunden wurde wie für U(IV) ein bevorzugter monodentater Sorptionskomplex sowie ein tridentat kettenverbrückender und einer an einer Defektstelle. Bidentat ans Substrat koordinierte Spezies entwickelten sich zu monodentaten. Cm(III) koordiniert 6-fach mit 2-5 OH-Liganden. Eine 7-fache Koordination, wie teils in der Zwischenschicht eines Tobermoritmodells, wurde bisher nicht gefunden. Mittlere U-O-Bindungslängen fallen etwas kürzer aus als in der Zwischenschicht und als aus Experimenten mit Eu<sup>3+</sup> bekannt. Es werden etwas weniger kurze U-Si-Abstände gefunden als im Experiment für Eu<sup>3+</sup>. Ein möglicher Beitrag der Adsorption zum Sorptionsmechanismus ist damit derzeit schwer einzuschätzen.

Die Untersuchung der Sorption von Eisen in C-S-H-Phasen (AP1.5) wurde fortgeführt. Für ein Tobermoritmodell mit C/S = 0.67 wurde die Sorption von Fe(II) in der Zwischenschicht betrachtet und es wurden bisher 7 Sorptionsplätze gefunden. Die Koordinationszahlen von Fe(II) variieren von 4 bis 6. Für kettenverbrückende Plätze wurde FeOH+ als Sorbat gefunden. Der Vergleich von Geometrien mit dem Experiment zeigt eine gute Übereinstimmung des mittleren Fe-O-Abstandes für CN = 5, ähnliche Fe-Si-Abstände, jedoch nur längere Fe-Ca-Abstände. Relative Energien der Sorptionskomplexe unterscheiden sich um bis zu 100 kJ/mol. Kettenverbrückende sowie Plätze an Defekten könnten bevorzugt sein. Für ein Tobermoritmodell mit C/S = 0.83 wird derzeit der systematische Austausch von Ca(II) gegen Fe(II) in der Zwischenschicht modelliert. Vorläufige Abschätzungen deuten auf eine exotherme Austauschenergie hin. Modellierungen zu ternären Actinoidenkomplexen  $[M_nAm(OH)_m]^{3+2n-m}$ , M = Ca, Mg, (AP2.3) wurden durch Vergleiche alternativer Isomere vervollständigt und abgeschlossen.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.1: Modelle

AP1.3: Sorption an (001)-Oberfläche AP1.5: Sorption und Konkurrenz Eisen

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch: Quantum Chemical Modeling of Actinide Interaction with Cement, in High Performance Computing in Science and Engineering, Hrsg. P. Bastian et al., Bayerische Akademie der Wissenschaften, 2021

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam                                 |                           | 02 E 11860F        |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |
| Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase |                           |                    |
| II (GRaZ II), Teilprojekt F  |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle         |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1   |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.10.2020 bis 30.09.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 482.418,00 EUR   | Prof. Dr. Kumk            | re                 |

An der Universität Potsdam (Physikalische Chemie) werden besonders Laser-basierte optische Methoden zur Untersuchung der in den Verbund-Arbeitspakete AP1 und AP2 definierten Fragestellungen eingesetzt und (weiter)entwickelt. Die methodischen Entwicklungen analytischer, optischer Methoden und die systematischen Untersuchungen haben die Verbesserung des molekularen Prozessverständnisses der Wechselwirkungen von Actinoid-Ionen (bzw. Lanthanoid-Ionen als Analoga) mit Zementalterationsphasen oder Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen (AP1) sowie silicatischen Ligandensystemen (AP2) zum Ziel. Das Vorhaben wird in dem 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

In dem Verbundprojekt wird die Rückhaltung von Radionukliden an Zementalterationsphasen und Bentonit unter geochemischen Bedingungen, die für die Tonformationen in Norddeutschland relevant sind (Standortmodell NORD), untersucht.

Das Verbundprojekt enthält vier Arbeitspakete (AP):

- AP1: Radionuklid-Rückhaltung an Zementalterationsphasen und Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- AP2: Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silicatischen Ligandsystemen
- AP3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung
- AP4: Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Laser- und das Kamera-Modul sind geliefert und installiert, die Strahlführung im Anregungs- und Emissionsstrahlengang ist aufgebaut und Testmessungen laufen. Besonders die Untersuchungen mit Yb(III) als NIR-Lumineszenzsonde stehen dabei im Vordergrund (AP1 und AP2).

In AP1 wurde die Herstellung der CSH-Templatphasen auf Basis von SiO<sub>2</sub>-Nanopartikeln (SiNP) CaO (ebenfalls Nanomaterial) fortgesetzt. Eu(III) wurde als optische Sonde bzw.

An(III)-Analogon eingesetzt und mittels TRLFS untersucht. Es werden ternäre Systeme "CSH+Eu(III)+Organik" untersucht bei pH-Werten > 12.

In AP2 wurden die Arbeiten zur Komplexierung von Ln(III) durch Kieselsäure(n) begonnen. In den ersten Experimenten wurden pH- und Ionenstärke-Einfluss für c(Si) unterhalb der "mononuclear wall" bei niedrigen pH-Werten (3 < pH < 5) untersucht. Durch die Anwendung von PARAFAC konnten die spektroskopischen Parameter eines 1:1- und eines 1:2-Komplexes sowie die dazugehörige Speziation erhalten werden. Allerdings zeigte sich, dass es auch/gerade bei diesen kleinen pH-Werten zu Alterungseffekten kommt. Weiterhin wurde ein Prototyp für eine elektrochemische Messzelle/Küvette für die Transienten-Absorptionsspektroskopie gebaut und erste Reduktionstests an Eisen durchgeführt, um in situ Fe(II) zu erzeugen.

Im Zusammenhang mit AP3 wurde ein monatlich stattfindendes Doktoranden- und Post-Doc-Seminar organisiert, mit Vorträgen zur Probenpräparation und zum Informationsaustausch der verschiedenen im Verbund genutzten Analysemethoden.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

In AP1 werden die Experimente mit "Nano"CSH-Templatphasen intensiviert bzw. fortgeführt. Es werden SiNP und CaO (als Nanomaterial) eingesetzt und der untersuchte Parameterraum (pH-Wert, C:S-Verhältnis, Feststoff-zu-Flüssigkeit-Verhältnis, Ionenstärke) angepasst. Schwerpunkt werden TRLFS-Untersuchungen in Kombination mit einer PARAFAC-Auswertung sein, ergänzt um weitere Charakterisierungsmethoden. Mit Abschluss der Installation des Laser- und des Kamera-Moduls wird Yb(III) als alternative Lumineszenzsonde eingesetzt, um so auch TRLFS-Untersuchungen in Gegenwart von Eisen durchführen zu können. Gegenüber Eu(III) hat Yb(III) den Vorteil, dass Eisen nicht (oder nur wenig) die Yb(III)-Lumineszenz löscht. Für diese Untersuchungen werden eisenhaltige AFm-Phasen hergestellt. Die verschiedenen CSH-Templatphasen werden auch bzgl. der Sorptionsdauer untersucht. Der Einfluss von organischen Komponenten (z. B. Gluconat, Phthalat) auf die Sorption/Inkorporation von Eu(III) an/in CSH-Phasen wird weiter untersucht.

Die Arbeiten zur Komplexierung von Eu(III) durch Kieselsäure(n) werden fortgesetzt (AP2). Besonderes Augenmerk wird pH-Werte > 10 gelegt werden. Es werden auch höhere Kieselsäure-Konzentrationsbereiche in die Betrachtungen einbezogen und hinsichtlich der Bildung von Polykieselsäuren (und Kolloiden) untersucht, hier gilt es z. B. auch den Alterungseinfluss zu beschreiben. Die Arbeiten zum PBTC werden in Kooperation mit der TU Dresden fortgesetzt, Weiterhin wird die Konstruktionsweise der elektrochemischen Messzelle optimiert und der finale Prototyp zu einer permanenten Messzelle fixiert. Nach der Verifizierung der Funktionalität mit nicht-radioaktiven Metallen erfolgt mit dieser Messzelle die Reduktion und In-situ-Messung von Uran(IV) aus Uranyl(VI) mittels Transienten-Absorptionsspektroskopie.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Bachelor-Arbeit von Frau Anna-Lena Müller "Kieselsäuren als Liganden für dreiwertige f-Elemente – Eu(III) Lumineszenz in Gegenwart von Kieselsäuren"

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| Technische Universität Dresden, Helmholtzstr.10, 01069 Dresden   |                           | 02 E 11860G        |
| Vorhabensbezeichnung:<br>Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase<br>II (GRaZ II), Teilprojekt G |                           |                    |
| <b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1               |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | ım:                |
| 01.10.2020 bis 30.09.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 374.721,00 EUR   | Prof. Dr. Stump           | of                 |

In dem Verbundvorhaben wird die Rückhaltung von Radionukliden an Zementalterationsphasen und Bentonit unter geochemischen Bedingungen, die für die Tonformationen in Norddeutschland relevant sind untersucht. Ziel ist die Aufklärung des geochemischen Verhaltens von Actiniden an/in Zementalterationsphasen und Bentonit unter dem Einfluss von Fe(II) und niedermolekularer organischer Liganden und Zementadditiven, die Erarbeitung grundlegender Erkenntnisse zur Wechselwirkung von Actiniden mit silikatischen und organischen Liganden bei mittleren bis hohen Ionenstärken und unter hyperalkalinen Bedingungen, die Nachwuchsförderung im Bereich nukleare Entsorgung sowie der Transfer und die Integration der Ergebnisse für einen Sicherheitsnachweis. Die Arbeiten dieses Teilprojektes beschäftigen sich mit dem Einfluss des von PBTC (2-Phosphanobutan-1,2,4-tricarboxylsäure), das in der Herstellung von Zement verwendet wird und während der Betondegradation freigesetzt werden kann, auf die Speziation von Actiniden im System SiO<sub>2</sub>/(Polysilikat)-Actinid-Organik unter endlagerrelevanten Bedingungen. Es sollen konsistente thermodynamische Standarddaten zur Komplexierung von PBTC mit Actiniden über SIT-Modellierung bestimmt sowie der Einfluss von PBTC auf die Wechselwirkung von Actiniden in silikathaltigen Lösungen charakterisiert werden. Das Projekt liefert einen wichtigen Beitrag für eine thermodynamisch fundierte Langzeitsicherheitsanalyse von nuklearen Endlagern. Das Forschungsvorhaben erfolgt in enger Kooperation mit den Projekten der Universitäten Mainz, Saarbrücken, München, Potsdam und Heidelberg sowie dem Institut für Ressourcenökologie vom Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf und dem Institut für Nukleare Entsorgung vom Karlsruher Institut für Technologie.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Arbeiten dieses Projektes sind im Wesentlichen in das Verbundarbeitspaket AP2 "Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silikatischen Liganden" angesiedelt.

AP-TU1: Untersuchungen zur Wechselwirkung von redoxstabilen Actiniden verschiedener Oxydationsstufen mit PBTC. Dieses AP beinhaltet die thermodynamische Charakterisierung der Protonierung des PBTC-Liganden, die ausführliche thermodynamische und strukturelle Charakterisierung der Komplexierung der Actinide (u. a. Am(III), Cm(III), Pu(III), Th(IV), U(VI), ggf. inaktive Analoga Eu(III), Nd(III)) mit dem PBTC-Liganden im sauren und alkalischen pH-Bereich als Funktion der Ionenstärke an NaCl und CaCl₂ sowie Untersuchungen zum Einfluss von Konkurrenzmetallionen (z. B. Fe²+) auf die Komplexierung. Hauptaugenmerk liegt auf der Charakterisierung möglicher ternärer Komplexe. Entsprechende thermodynamische Standarddaten zur Komplexbildung (log<sub>10</sub>β<sup>0</sup><sub>n,m</sub>,  $\Delta_r H_m^0$ ,  $\epsilon_{l,k}$ ) werden aus SIT-Modellierungen abgeleitet.

AP-TU1: Untersuchungen zum Einfluss von Zementadditiven auf die Wechselwirkung von redoxstabilen Actiniden/ Lanthaniden in silikatischen Lösungen. In diesem AP wird der Einfluss von relevanten Liganden (Citrat, PBTC, Gluconat) auf die Eigenschaften von silikatischen Lösungen/Suspensionen bezüglich ihrer Speziation und daraus abgeleitet auf die Wechselwirkungen mit Actiniden untersucht.

Geplant sind Batchsorptionsuntersuchungen mit Actiniden in gut charakterisierten (Poly)silicat-Ligand-Suspensionen. Die Sorptionsisothermen und Verteilungskoeffizienten (K<sub>d</sub>-Werte) sollen als Funktion der Ionenstärke (bis 3 m NaCl, CaCl<sub>2</sub>) und des pH-Wertes bestimmt werden.

#### AP-TU1a)

1) Bei Untersuchungen zur Komplexierung/Protonierung des PBTC-Liganden mittels NMR-Spektroskopie wurde festgestellt, dass dieser nicht die notwendige Reinheit aufweist. Es wurden neben PBTC auch andere P-haltige Nebenprodukte detektiert. Daraufhin wurden diverse PBTC-Chargen von verschiedenen Lieferanten mittels NMR-Spektroskopie (in Zusammenarbeit mit dem HZDR) auf ihre Reinheit charakterisiert. Die höchste Reinheit (93 %) hat das Produkt der Firma TCI Chemicals, welches derzeit nachfolgend für alle Untersuchungen verwendet wird. Des Weiteren wurden Vorversuche zur Aufreinigung des PBTC-Liganden mittels präparativer HPLC durchgeführt. Jedoch ist eine Trennung des PBTC-Signals im Chromatogramm zu denen der Verunreinigungen bisher nicht vollständig möglich. Die Versuche zur Aufreinigung des PBTCs werden derzeit noch optimiert.

 $\underline{2}$ ) Es wurden NMR-spektroskopische und titrationskalorimetrische Versuche zur Bestimmung der ionenstärkeabhängigen pKs-Werte von PBTC durchgeführt. Vom Kooperationspartner Prof. M. Kumke (Uni Potsdam) wurden potentiometrische Titrationen bei I 0,5, 1, 2, 4 m NaCl durchgeführt. Die ersten Test-NMR-Messungen wurden ohne definierte Ionenstärke (Hintergrundelektrolyt) durchgeführt und ergaben pKs-Werte von 0,9 (Deprotonierung der 1. Phosphonsäuregruppe), 4,0/4,7/6,0 (Deprotonierung der Carboxylgruppen) und 9,4 (Deprotonierung der 2. Phosphonsäuregruppe). Der 1. pKs-Wert ist somit deutlich kleiner als der Literaturwert mit 3,8 (I = 0,5 m NaNO<sub>3</sub>). Eine Wiederholung der Messungen mit NaCl als Hintergrundelektrolyt (I = 0,5 m) und die Auswertung der Daten ist in Arbeit. Die Auswertung der titrationskalorimetrischen Messungen hinsichtlich der Protolyseenthalpien von PBTC ( $\Delta H_2$  bis  $\Delta H_5$ ) ist ebenfalls in Arbeit. Für eine sinnvolle Kurvenanpassung müssen jedoch die separat bestimmten pKs-Werte (siehe oben) als festgelegte Parameter eingeben werden.

#### AP-TU1b)

1) Mit der Charakterisierung U(VI)-PBTC und Eu(III)/Nd(III)-PBTC Komplexierung im sauren bis neutralen pH-Bereich wurde begonnen. Es wurden cryo-TRLFS- und UV/VIS-Experimente bei unterschiedlichen pH-Werten mit 0,5 m NaCl als Hintergrundelektrolyten durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen, dass bei einem pH-Wert von ~ 2 keine Komplexierung des PBTCs mit U(VI) erfolgt. Erst bei höheren pH-Werten >> 2 ist eine Komplexbildung zu verzeichnen, wobei pH-abhängig sich zwei unterschiedliche Komplexspezies bilden. Im pH-Bereich 3-4 bildet sich ein 1:1 Komplex, der sich deutlich von der Komplexspezies im pH-Bereich 5-6 unterscheidet. Obwohl eine Bildung des Komplexes bei pH 2 mittels TRLFS nicht detektiert wurde, bleibt der Komplex, der sich bei einem pH-Wert von ~5 bildet, während einer pH-Titration in den stark sauren Bereich (bis mindestens pH 2) stabil. Die TRLFS-Untersuchungen der Eu(III)-PBTC-Komplexierung im pH-Bereich von 2 bis 6 zeigen, dass nur eine Komplexspezies (1:1 Komplex) gebildet wird, beginnend bei pH >> 2. Eine detailliertere Auswertung der TRLFS-Daten mittels paralleler Faktoranalyse erfolgt im nächsten Berichtszeitraum.

2) Diverse titrationskalorimetrische Versuche zur U(VI)-PBTC- sowie Nd(II)-PBTC-Komplexierung wurden durchgeführt. Im U(VI)-PBTC-System zeigte sich, dass herkömmliche kalorimetrische Titrationen (Ligandtitration zu Metallion) nicht durchführbar sind, da deutliche pH-Änderungen erfolgen, die in den Wärmekurven mit detektiert werden und eine Auswertung der Kurven nahezu unmöglich machen. Der Ansatz einer pH-Titration des vorgelegten U(VI)-PBTC-Komplexes scheint hier erfolgreicher zur sein. Sowohl im U(VI)-PBTC- als auch Nd(II)-PBTC-System deuten die Wärmekurven auf eine 1:1 Komplexierung hin. Eine exakte Auswertung der erhaltenen Daten kann jedoch erst nach thermodynamischen Charakterisierung der Protolyse des PBTCs erfolgen (siehe oben).

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP\_TII1

Fortsetzung und Abschluss der spektroskopischen und thermodynamischen Charakterisierungen zur Protolyse und zur Komplexierung von U(VI)/Nd(III)/Eu(III) mit PBTC (bis pH 6, NaCl-Medium) mittels NMR-, FTIR- und TRLF-Spektroskopie, theoretische Rechnungen (in Zusammenarbeit mit dem HZDR) sowie Titrationskalorimetrie, anschließend Erweiterung der Untersuchungen auf den alkalischen pH-Bereich sowie CaCl<sub>2</sub>-Medium.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |   | Förderkennzeichen: |
|--|---|--------------------|
| Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg  | Jniversität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg |                    |
| Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase   |   |                    |
| II (GRaZ II), Teilprojekt H <b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1 |   |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra  | um:                |
| 01.10.2020 bis 30.09.2023  | 01.01.2021 bis  | 30.06.2021         |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:  |                    |
| 403.292,00 EUR   | Prof. Dr. Panak   |                    |

Das Thema des Forschungsvorhabens ist die Rückhaltung von Radionukliden (Actiniden) im Nahfeld eines Endlagers für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle in Tonsteinformationen gemäß dem "Standortmodell NORD". Für den Sicherheitsnachweis eines solchen Endlagers gibt es Wissenslücken zum Einfluss von gelöstem Eisen, das bei der Korrosion der Einlagerungsbehälter freigesetzt wird sowie von organischen und silicatischen Liganden, die aus der Beton- bzw. Zementkorrosion der technischen Barriere resultieren. Deshalb soll der Einfluss von Eisen sowie der organischen und silicatischen Liganden auf die Radionuklidrückhaltung an Zementkorrosionsphasen und dem Bentonitpuffer unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken quantifiziert werden. Dazu werden die Prozesse Sorption, Diffusion, Komplexierung, Redoxtransformation und Löslichkeit mit experimentellen und quantenchemischen Methoden untersucht und mithilfe von thermodynamischen Modellen beschrieben. Die zu erwartenden wissenschaftlichen Ergebnisse werden den grundlegenden Kenntnisstand auf dem Gebiet der geochemischen Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen deutlich erweitern und tragen damit direkt zur Optimierung einer thermodynamisch fundierten Sicherheitsanalyse zur Langzeitsicherheit von nuklearen Endlagern bei. Des Weiteren werden wichtige grundlegende Erkenntnisse bezüglich des Komplexierungsverhaltens von Actiniden erhalten, die auch in anderen wissenschaftlichen Bereichen von besonderer Bedeutung sind.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP2.1: Komplexierung von Actiniden mit ausgewählten organischen Referenzliganden
- AP2.2: Komplexierung von Actiniden mit ausgewählten Zementadditiven
- AP2.3: Wechselwirkung von Actiniden mit silicatischen Systemen: Speziation und Thermodynamik
- AP3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung
- AP4: Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis

Im Rahmen von AP2.1 wurde die Komplexierung von Cm(III) mit Oxalat als Modellligand für mittels zeitaufgelöster Polycarboxylat-Superplasticizer Laserfluoreszenzspektroskopie (TRLFS) untersucht. In Ergänzung zu den Ergebnissen aus dem Vorgängerprojekt GRaZ I wurden die Untersuchungen auf den alkalischen pH-Bereich ausgedehnt. Dabei wurde zum einen bei einer konstanten Ionenstärke von I<sub>m</sub> = 2 m (NaCl) die Oxalatkonzentration im Bereich von 7.5 – 99.0 mM variiert, während im Rahmen einer weiteren Untersuchung Messungen bei konstanter Oxalatkonzentration ([Ox $^{2-}$ ] = 75.0 mM) aber unterschiedlichen Ionenstärken ( $I_m$  = 0.1 m, 2 m und 4 m) durchgeführt wurden. Alle Proben wurden in einer Argon-Inertgasbox unter Ausschluss von CO<sub>2</sub> präpariert. Dabei wurde zunächst der [Cm(Ox<sup>2</sup>-)<sub>3</sub>]<sup>3</sup>-Komplex bei pH 5 hergestellt und im Anschluss daran der pH-Wert schrittweise erhöht. Für alle Proben wurden Fluoreszenzspektren im pH-Bereich von 4 - 12 aufgenommen. Als Referenzprobe diente eine Cm(III)-Lösung ohne Oxalat mit I<sub>m</sub> = 2.0 (NaCl), deren Fluoreszenzspektren bei denselben pH-Werten gemessen wurden.

Die Auswertung der Spektren zeigte, dass mit steigendem pH-Wert die Oxalatkomplexierung und die Hydrolysereaktion von Cm(III) zunehmend in Konkurrenz treten. Während bei der Referenzprobe ohne Oxalat die Fluoreszenzintensität bereits für pH-Werte > 6.5 signifikant abnahm, was auf die Bildung von Cm(III)-Hydroxo-Kolloiden bzw. –festphasen zurückzuführen ist, wurde die Hydrolyse mit zunehmender Oxalatkonzentration mehr und mehr zurückgedrängt. Bei der höchsten untersuchten Oxalatkonzentration ( $[Ox^2-]=99.0$  mM) blieb die Fluoreszenzintensität bis pH = 10 nahezu konstant und nahm erst für pH-Werte > 10.5 deutlich ab. Die Untersuchungen bei konstanter Oxalatkonzentration und unterschiedlichen Ionenstärken zeigten zudem, dass auch mit zunehmender Ionenstärke eine geringfügige Reduktion der Hydrolysereaktion erfolgte, wobei dieser Effekt nicht signifikant ausgeprägt war.

Weitere Untersuchungen der jeweiligen Proben bei pH 12 nach einem Zeitraum von 24 h zeigten jedoch, dass der oben beschriebene Effekt rein kinetischer Natur war. Nach Einstellung des thermodynamischen Gleichgewichts lagen bei allen Oxalatkonzentrationen ausschließlich Hydrolyseprodukte vor, was bedeutet, dass die Hydrolysereaktion eindeutig die dominierende Reaktion darstellte. Somit kann in diesem pH-Bereich der Einfluss von niedermolekularer Organik auf die Speziation von Cm(III) ausgeschlossen werden. Auch ternäre Komplexe (Cm(III)-Hydroxy-Oxalat-Komplexe) wurden im Laufe dieser Untersuchungen nicht beobachtet. Vergleichende Untersuchungen in Anwesenheit von CO<sub>2</sub> ergaben ähnliche Ergebnisse. Dabei stellte jedoch die Bildung von gelösten Cm(III)-Carbonatspezies die dominierende Reaktion dar.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- Grundlegende Untersuchungen zur Polymerisation von Silikatlösungen.
- Erste Untersuchungen zur Komplexierung von Cm(III) mit Orthosilikaten.
- Ausweitung der Studien zur Wechselwirkung von An(III)/Ln(III) mit polymeren Polycar-boxylat-Superplasticizern auf den neutralen bis alkalischen Bereich.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:   |                           | Förderkennzeichen: |
|--|---------------------------|--------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   |                           | 02 E 11870A        |
| Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A                           |                           |                    |
| <b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3 |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitrau           | um:                |
| 01.01.2021 bis 31.12.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |
| 963.287,72 EUR   | Dr. Melesyhn              |                    |

Die Ziele des Verbundvorhabens sind: 1. Aufklärung des Mechanismus der Zersetzung von Karbonaten und CO<sub>2</sub>-Freisetzung in Bentoniten, 2. Bestimmung der Gründe für die beobachtete Acidität der Bentonite bei erhöhten Temperaturen, 3. Beitrag zur Aufklärung des Lösungs-bzw. Umwandlungsmechanismus der Smektite in Bentoniten, 4. Beitrag zur Aufklärung der Metallkorrosion durch Wechselwirkung mit Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss unter Einsatz von optimierter Mössbauerspektroskopie, 5. Mechanistisches Verständnis der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion strukturellen Eisens in Smektiten auf atomarem Niveau mit Hilfe von quantenchemischen Modellierungen.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Zum Erreichen der oben genannten Ziele sind aufeinander abgestimmte experimentelle und analytische Arbeiten in den Laboren der Verbundprojektpartner sowie quantenchemische Modellierungen und geochemische Modellierung vorgesehen.

Im AP1 "Zersetzung von Karbonaten und CO<sub>2</sub>-Freisetzung" (Federführung: GRS) sollen dafür im GRS-Labor Versuche mit Bentoniten, reinen Mineralphasen und aus diesen hergestellten Mineralgemischen in Metallzylindern bei 120 °C sowie anschließende Gasanalysen und Bestimmungen der Karbonatgehalte, pH-Werte und Zusammensetzungen der Kontaktlösungen durchgeführt werden. Die Versuche und ihre Auswertung sollen durch die unterstützende geochemische Modellierung begleitet werden.

Im AP6 koordiniert die GRS die Arbeiten im Verbundprojekt.

Im Berichtszeitraum wurden notwendige Anschaffungen für die Durchführung der ersten Versuchsreihen im AP1 getätigt. Es wurden Proben unterschiedlicher reiner Mineralphasen aus den Beständen der BGR, UG und GRS vorbereitet und ausgetauscht. Die ersten Versuchsreihen zur Ermittlung des optimalen Feststoff-Flüssig-Verhältnisses, der CO<sub>2</sub>-Freisetzung aus der Kontaktlösung, der Reproduzierbarkeit der Messungen, der reaktiven Mineralphasen, des Einflusses der Minerale auf den Dampfdruck der Lösung und zur Herstellung der Bentonitproben für Beamline-Computertomographie werden derzeit vorbereitet. Eine detaillierte Abstimmung der Versuchsdurchführung im AP1 erfolgte in Videokonferenz-Projektgesprächen mit Beteiligung von BGR/UG bzw. LUH-IfBK.

Die Koordination des Verbundprojektes bestand in der Organisation des Kick-off-Videokonferenzworkshops sowie der dabei als notwendig identifizierten Abstimmungen, der Vorbereitung und Abstimmung des Kooperationsvertrages und der Vorbereitung des zweiten im Herbst auszurichtenden Videokonferenzworkshops.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Vorbereitungen und Starten der Versuchsreihen im AP1
- Abschluss des Kooperationsvertrags
- Organisation des zweiten Projektworkshops

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |   | Förderkennzeichen:   |
|--|---|----------------------|
|  | Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. |                      |
| 400, 01328 Dresden   |   | 02 E 11870B          |
| Vorhabensbezeichnung:  |   |                      |
| Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bo                                   | entonitbarrieren -  | – Phase II (UMB II), |
| Teilprojekt B  |   |                      |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |   |                      |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                       |   |                      |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra  | um:                  |
| 01.01.2021 bis 31.12.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021                                     |                      |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:  |                      |
| 359.046,00 EUR   | Dr. Matschiave  | 11i                  |

Bentonit-basierte Nahfeldbarrieren können in einem Endlager für hoch-radioaktive Abfälle aufgrund erhöhter Temperaturen und einer Wechselwirkung mit wässrigen Lösungen aus dem umliegenden Wirtsgestein eine für die Langzeitsicherheit des Endlagers relevante Umwandlung erfahren. Im Projekt UMB wurde festgestellt, dass bei 25, 90 und 120 °C eine erhebliche pH-Absenkung sowie eine CO<sub>2</sub>-Gasbildung durch eine teilweise bis vollständige Zersetzung der in Bentoniten vorhandenen Karbonate ablaufen kann. Im Projekt UMB-II sollen die beteiligten Reaktionsmechanismen aufgeklärt werden. Weitere Arbeitsschwerpunkte sind (i) die Abhängigkeit der Lösungsrate der Smektite vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und –produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mössbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population.

Die unter (iv) genannten mikrobiellen Arbeiten werden am HZDR durchgeführt. Hierzu werden Mikrokosmen angesetzt, welche mit einem Bentonit (B27 oder GMZ), synthetischer Opalinuston-Porenlösung (OPA) und Gusseisenplättchen (Typ GGG40) versehen werden. Die Ansätze inkubieren für mindestens ein Jahr jeweils bei 37 und 90 °C mit und ohne Zugabe von Wasserstoff.

Innerhalb der Kooperationspartner (Förderkennzeichen 02E11870)

Leibniz Universität Hannover, Institut für anorganische Chemie; Leibniz Universität Hannover, Institut für Bodenkunde; Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Bereich Endlagerforschung, Braunschweig; Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Arbeitsbereich Technische Mineralogie, Hannover; Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Institut für Geographie und Geologie, Greifswald; Technische Universität München, Lehrstuhl für theoretische Chemie

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Thematik des UMB-II Projektes wird in 6 Arbeitspaketen (AP) bearbeitet, wobei das HZDR an der Bearbeitung des AP4 "Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss" beteiligt ist.

- Ansetzen und Beproben von Mikrokosmen über einen Zeitraum von Mindestens 12 Monaten
- Bestimmung bio-geochemischer Parameter (z. B. pH-Wert, Eh, Fe(II/III) in Mikrokosmen
- Extraktion von DNA aus inkubierten Mikrokosmen und Bentonit-Ausgangsmaterialien
- Bestimmung mikrobieller Diversität (PCR, RISA, Sequenz-Analyse)
- Mikroskopische Analyse der Gusseisen-Korrosion mittels SEM-EDX
- Ggf. Anreicherung von Mikroorganismen aus inkubierten Mikrokosmen

Am HZDR wird der Einfluss der im Bentonit enthaltenen mikrobiellen Population auf die Korrosion von Gusseisenplättchen analysiert. Zu diesem Zweck sollen Mikrokosmen angesetzt werden, welche den Bentonit GMZ-001 oder B27 beinhalten sowie synthetische, anaerobe Opalinuston-Porenlösung und Gusseisenplättchen (Typ GGG40). Für die Simulation einer beginnenden Kanister-Korrosion in einem Endlager für HAW, werden einige Ansätze mit Wasserstoff versehen. Kontrollansätze beinhalten zweifach autoklavierten Bentonit. Innerhalb des ersten Bericht-Zeitraums wurden vorbereitende Arbeiten durchgeführt, um ein möglichst störungsfreies und strukturiertes Ansätzen der Mikrokosmen bzw. deren Beprobung und Analyse zu ermöglichen.

Für das Bereiten der Mikrokosmen war es notwendig, den Gelierpunkt der beiden Bentonite in wässriger Lösung festzustellen. Hierbei zeigte sich, dass ein gutes Bentonit:OPA-Verhältnis bei 1:10 (GMZ-001) bzw. 1:20 (B27) vorliegt. Des Weiteren wurde die Auswirkung des zweifachen Autoklavierens auf die Mineralogie der zwei Bentonite *via* Mößbauerspektroskopie untersucht (durchgeführt an der LUH-ACI). Hiernach konnte festgestellt werden, dass sich der Autoklaviervorgang nicht signifikant auf die beiden Bentonite auswirkt und diese Methode zum Abtöten der Mikroorganismen in den Kontroll-Ansätzen genutzt werden kann. Für eine weitere Charakterisierung von B27 und GMZ-001 wurde unter Nutzung der Ferrozin-Methode die Fe(II)-und Fe(III)-Konzentration bestimmt. Hier konnte festgestellt werden, dass die Eisenkonzentration der beiden Bentonite eher niedrig ist (3,0 mM Fe(II) bzw. 10,0 mM Fe(III) für GMZ-001 und 2,6 mM Fe(II) bzw. 2,6 mM Fe(III) für B27).

Die GRS stellte grobe Zuschnitte (weit über 500 Stück) der GGG40 Plättchen bereit. CLSM-Analysen (durchgeführt an der LUH-IfBK) haben gezeigt, dass die Plättchen für Oberflächen-Analysen zu rau sind. Die Plättchen wurden daher geschliffen, entgratet und anschließend an einer Seite mit 600 grit-Schleifpapier poliert. Da ein Teil der Plättchen zur Hälfte beschichtet werden soll, um eine Plättchen-eigene Referenzfläche zu generieren und die Korrosions-Schäden so besser bewerten zu können, wurden unterschiedliche Beschichtungen getestet (Gold-Beschichtung ["sputtering"], Teflon-Spray, Silikon, Kapton-Band und Kupfer-Band). Am besten geeignet scheint hierfür eine Beschichtung mit Silikon, da diese chemisch inert und relativ gut und rückstandslos zu entfernen ist, ohne Schäden an der Metalloberfläche zu hinterlassen. Die für den Ansatz notwendigen Metallplättchen werden daher mit Silikon beschichtet.

Mit Hilfe von lichtmikroskopischen Methoden sowie SEM-EDX und AFM konnten Mikroorganismen auf Test-Plättchen visualisiert werden. Für eine Charakterisierung der Korrosionsprodukte erscheinen SEM-EDX und RAMAN als die am besten geeignete Methode.

Bedingt durch SARS-CoV-2 waren die Labore am HZDR bis Anfang März 2021 geschlossen, so dass es zu Verzögerungen bei den Laborarbeiten kam. Notwendige Vorbereitungen für den Ansatz der Mikrokosmen konnten jedoch im ersten Berichtszeitraum durchgeführt und erfolgreich abgeschlossen werden.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Berichtszeitraum des UMB II Projektes sollen die insgesamt 224 Mikrokosmen angesetzt und erste Probenahmen durchgeführt werden. Die Mikrokosmen sollen hinsichtlich bio-geochemischer Parameter (pH, Eh, Fe(II/III), Metallionen, organische Säuren, Sulfat) sowie der mikrobiellen Diversität näher analysiert werden. Des Weiteren sind auch erste SEM-EDX-Analysen der GGG40 Plättchen geplant, um mögliche Rückschlüsse auf einen möglichen mikrobiellen Einfluss auf die Korrosion des Metalls und die Eigenschaften des Bentonits ziehen zu können.

Ausgewählte Mikrokosmen können hinsichtlich geochemischer Veränderungen im Bentonit und/oder Bentonit/GGG40-Grenzflächen näher untersucht werden. Hierzu wird sich mit den jeweiligen Kooperationspartnern ausgetauscht und die Proben werden je nachdem aufbereitet und an die jeweiligen Partner versandt (FIB-SEM an der UG, Mössbauerspektroskopie am LUH-ACI, allgemeine tonmineralogische Veränderungen an der UG).

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Matschiavelli, N., "Kick-off-Meeting" des Verbundprojektes UMB-II, Kick-off meeting UMB II (online), 20.01.09.2021

Matschiavelli, N., Future perspectives on microbial influenced corrosion – some experimental approaches, interne Abteilungsbesprechung, (online), 26.02.09.2021

| Zuwendungsempfänger:                                     |  | Förderkennzeichen:   |  |
|--|--|----------------------|--|
| Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifsw        | vald   | 02 E 11870C          |  |
| Vorhabensbezeichnung:                                    |  |                      |  |
| Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Be             | entonitbarrieren -   | – Phase II (UMB II), |  |
| Teilprojekt C  |  |                      |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschun                | Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                      |  |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3 |  |                      |  |
| Laufzeit des Vorhabens: Berichtszeitraum:                |  | um:                  |  |
| 01.01.2021 bis 31.12.2023                                | 01.01.2021 bis 30.06.2021  |                      |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens: Projektleiter:               |  |                      |  |
| 244.830,00 EUR   | Prof. Dr. Warr   |                      |  |

The aim of this project contributes to

- studying the alteration mechanism of synthetic smectite mixtures as a function of solution composition, mineralogy and temperature using laboratory tests
- identifying the different reaction processes involved in different synthetic mixtures
- correlating the chemical-mineralogical changes in different synthetic smectite mixtures

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Purification and analysis of bulk pure smectite samples and other minerals
- AP2: Mixing and characterization of synthetic bentonite samples for batch reactor experiments at the GRS, UG and BGR
- AP3: Monitoring and mineralogical/geochemical analyses of experiments (XRD, XRF, CEC etc.)
- AP4: More detailed analysis of batch experiments and data analyses
- AP5: Electron microscopy Investigation of experimental products
- AP6: Data analysis and comparison of synthetic bentonites with natural mixtures
- AP7: Evaluation (mechanisms)
- AP8: Reports

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Our scientific researcher (Ritwick Sudheer Kumar) was employed only from the 1.4.2021. Therefore we are currently working 3 months behind our project plan. Due to the pandemic, the number of people allowed in the laboratories has also been limited, meaning we have not been able to work to full effectiveness. However, despite the restrictions, we were able to successfully separate the first pure smectite samples in bulk and to make the first synthetic bentonite mixtures that have been sent to the GRS and the BGR for batch reactor experiments.

We began our activities by preparing pure smectite, the separation of  $< 1 \mu m$  size fraction from Moosburg bentonite (TS 1057), which was carried out till May 2021. The procedure involved sodium saturating the bentonite, removal of NaCl by washing with ethanol, and size separation using Stokes' law. To analyze the purity of the smectite content, XRD and EDS-SEM measurements were carried out. The XRD measurement displayed a pure smectite pattern, but we

have not yet successfully modelled it using Rietveld refinement. Based on the EDS-SEM measurements, no chemical elements detected other than those involved in the smectite chemistry were detected. The smectite fraction is therefore considered to be reasonably pure with minimal contamination by other mineral species.

For the GRS experiments, ten mineral mixtures were made in the laboratory using various types of pure mineral additives (calcite, pyrite, phlogopite etc). The strategy used for mixing were i) micronizing all minerals except for the purified smectite, ii) measuring the XRD patterns of all the micronized minerals to identify possible impurities and iii) mixing the samples in ethanol using the Planetary centrifugal (Thinky) mixer purchased with funds of this project.

In addition to the TS-1057 Moosburg bentonite, a nontronite from Hedemünden (near Göttingen) is being studied as an example of Fe-rich smectite. The same separation technique was used as for the Moosburg bentonite to obtain a pure smectite fraction. A particular challenge here is to remove all fine-grained goethite and this sample still needs some quality control (e.g. TEM study) to see if chemical treatment is required. Adding iron-rich smectite along with the Moosburg smectite to the batch reactor experiments will provide a better understanding of the role of structural iron in smectite during the batch reactor experiments.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Preparing the mixtures and carrying out the batch reactor experiments are our priority. Further mixtures will be prepared using the same methodology as the GRS and BGR mixtures. These mixtures will be studied in Greifswald using the "Nabertherm BMUD30" oven, which was purchased with funds from this project. After the experiments are complete, mineralogical and geochemical analyses such as XRD, XRF, CEC, and EDS-SEM will be undertaken on the reacted samples to characterize expected alterations. These are planned to be completed by the end of 2021. Further batch reactor experiments will be prepared accordingly after observing the first batch of experiments. These experiments are been conducted in close collaboration with the experimental work of the GRS and the BGR to cover a broader scope of experimental conditions.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Podlech, C.; Matschiavelli, N.; Grathoff, G.H., Warr, L.N. (submitted): Bentonite alteration in batch reactor experiments with and without fertilizing agents: implications for the disposal of radioactive waste. Minerals, (Special volume: Clay Mineral Transformations after Bentonite/Clayrocks and Heater/Water Interactions from Lab and Large-Scale Tests)

Manzel, G.H., Podlech, C. Grathoff, G., Kaufhold, S, A., Warr, L.N. (close to submission): In situ measurements of the hydration behaviour of compacted Milos (SD80) bentonite by wetcell X-ray diffraction in an Opalinus clay pore water and a diluted cap rock brine. Minerals (Special volume: Clay Mineral Transformations after Bentonite/Clayrocks and Heater/Water Interactions from Lab and Large-Scale Tests)

Sudheer Kumar, R., C. Podllech, Grathoff, G., Warr, L.N., Svensson, D. (close to submission): Mineralogical alterations under the enhanced thermal conditions of the ABM-5 (SKB) bentonite buffer experiments. Minerals, (Special volume: Clay Mineral Transformations after Bentonite/Clayrocks and Heater/Water Interactions from Lab and Large-Scale Tests)

| Zuwendungsempfänger:   | Zuwendungsempfänger:      |             |
|--|---------------------------|-------------|
| Technische Universität München, Arcisstr. 21, 803  | 333 München               | 02 E 11870D |
| Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D                           |                           |             |
| <b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3 |                           |             |
| Laufzeit des Vorhabens: Berichtszeitraum:  |                           |             |
| 01.01.2021 bis 31.12.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |             |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |             |
| 302.335,00 EUR   | Dr. Krüger                |             |

- Quantenmechanische Modellierung von Fe(II)-Substitutionen in Smektiten
- Abschätzung des Redoxpotentials von Eisensubstitutionen in Smektiten

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

- Methoden und Modelle
- Fe(II) in Smektiten
- Fe(II) in und an Smektitoberflächen
- Zwischenschichtionen in Smektiten
- Eisenkorrosionsphasen

Die zentralen Themen des Projektes sind die rechnerische Modellierung von Fe(II)-Substitutionen in Smektiten (AP2) in Abhängigkeit von Struktur, Ladung und anderer Substitutionen sowie die Abschätzung entsprechender Redoxpotentiale für Fe(II)/Fe(III). Weiterhin werden Fe(II)-Substitutionen in Oberflächen von Smektiten sowie die Sorption von Fe(II) an Oberflächen untersucht (AP3), um Fe(II) in Smektiten umfassend zu charakterisieren. Daneben ist vorgesehen, Solvatation und Koordination von Zwischenschichtionen, die geladene Substitutionen wie Fe(II) kompensieren, zu untersuchen. Mit der Berechnung relativer Energien von Eisenkorrosionsphasen werden Arbeiten der Projektpartner unterstützt.

AP1: Modelle und Methoden; AP2 Fe(II) in Smektiten

Der Vergleich von Modellierungen mit verschiedenen Gittern im reziproken Raum (AP1) am Beispiel von Pyrophyllit mit Fe(II)- und Fe(III)-Substitutionen dient der Überprüfung der Genauigkeit der Rechnungen mit verschiedenen Oxidationsstufen. Darüber hinaus zeigen erste Ergebnisse, dass eventuell effiziente und genaue Rechnungen mit einem einzigen Gitterpunkt in Richtung des c-Vektors möglich sind.

Die im Vorgängerprojekt durchgeführte Machbarkeitsstudie zu oktaedrischen Fe(II)-Substitutionen in Smektiten und zur Abschätzung des Redoxpotentials von Eisen in Smektiten, die an transvakanten Pyrophyllit- und Beidellitmodellen mit solvatisierten Zwischenschichtionen durchgeführt wurde, wurde um ein ebensolches Montmorillonitmodell ergänzt (AP2). Im Gegensatz zu Fe(III)-Substitutionen, deren Energie in Abhängigkeit vom Substitutionsplatz und der Entfernung von einer Mg(II)-Substitution um bis zu 10 kJ/mol variiert, wurde für Fe(II) eine Variation von bis zu 70 kJ/mol erhalten. Zu einer Mg(II)-Substitution benachbarte oder übernächste Substitutionsplätze sind um etwa 70 kJ/mol bzw. um bis zu 30 kJ/mol ungünstiger als entferntere Plätze. Dies deutet darauf hin, dass eine oktaedrische Mg(II)-Substitution zu mehr ungünstigen Plätzen für oktaedrisches Fe(II) führt als eine tetraedrische Al(III)-Substitution. Für letzteren Fall wurden nur zwei Plätze mit erhöhter Energie nahe der tetraedrischen Substitution beobachtet.

Detailliertere Modellierungen zu oktaedrischen Fe(II)-Substitutionen in Smektiten wurden für cisvakanten Pyrophyllit als Modell eines schwach substituierten Smektits aufgenommen (AP2). Dabei werden Fe(II)-Substitutionen durch ein Zwischenschichtion ohne Solvatation kompensiert. Für eine einzelne Fe(II)-Substitution wurde wie für Fe(III) ein sehr geringer Energieunterschied zwischen den beiden möglichen Substitutionsplätzen von weniger als 2 kJ/mol berechnet. Der Vergleich äquivalenter Substitutionsplätze in der Einheitszelle ergab eine Reproduzierbarkeit von Energien besser als 0.5 kJ/mol. Systematische Rechnungen zu zwei Fe(II)-Substitutionen in cisvakantem Pyrophyllit ergaben deutliche Energieunterschiede in Abhängigkeit des Abstandes der Substitutionen. Während frühere Rechnungen zu Fe(III) einen Unterschied zwischen benachbarten und entfernten Substitutionen von bis zu 10 kJ/mol ergaben, werden für benachbarte Fe(II)-Substitutionen bis zu 90 kJ/mol erreicht. Auch Energiewerte für Fe(II)-Paare mit gleichem Abstand variieren, gewöhnlich um etwa 30 kJ/mol. Dies ist weitgehend auf die Anordnung der kompensierenden Na<sup>+</sup>-Ionen in der Zwischenschicht zurückzuführen und wird derzeit untersucht. Mit Rechnungen zu analogen Modellen mit solvatisierten Zwischenschichtionen wurde begonnen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Modelle und Methoden AP2: Fe(II) in Smektiten

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |  | Förderkennzeichen:   |
|--|--|----------------------|
| Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30                               | Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover |                      |
| Vorhabensbezeichnung:  |  |                      |
| Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Be                                   | entonitbarrieren -   | – Phase II (UMB II), |
| Teilprojekt E  |  |                      |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |  |                      |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                       |  |                      |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra   | um:                  |
| 01.01.2021 bis 31.12.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021                                    |                      |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:   |                      |
| 228.860,00 EUR   | Prof. Dr. Renz   |                      |

Bentonit-basierte Nahfeldbarrieren können in einem Endlager für hoch-radioaktive Abfälle aufgrund erhöhter Temperaturen und einer Wechselwirkung mit wässrigen Lösungen aus dem umliegenden Wirtsgestein eine für die Langzeitsicherheit des Endlagers relevante Umwandlung erfahren. Im Projekt UMB wurde festgestellt, dass bei 25, 90 und 120 °C eine erhebliche pH-Absenkung sowie eine CO<sub>2</sub>- Gasbildung durch eine teilweise bis vollständige Zersetzung der in Bentoniten vorhandenen Karbonate ablaufen kann. Im Projekt UMB-II sollen die beteiligten Reaktionsmechanismen aufgeklärt werden. Weitere Arbeitsschwerpunkte sind (i) die Abhängigkeit der Lösungsrate der Smektite vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und –produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mößbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Mößbauerspektroskopische Messungen und Auswertungen von Bentonitmaterialien zur Aufklärung des Fe(II)/Fe(III) Verhältnisses aus den Versuchen der anderen Projektteilnehmer (Speziation)
- AP2: Analytischer Beitrag zur Korrosionsratenbestimmung an der Eisen-Bentonit-Grenzfläche
- AP3: Optimierung der Methoden in der Mößbauerspektroskopie zur Verbesserung der Messergebnisse

Zum 01.07.2021 wurde ein PostDoc eingestellt, der die Aufgaben, die im Rahmen des Projektes anfallen, bearbeitet.

AP1 & 2: Es wurden Mößbauermessungen von vorbereiteten Proben des BGR und HZDR vorgenommen.

AP3: Es wurden Detektoren gebaut, welche eine bessere Energieauflösung aufweisen. Entwicklung zum Ersatz der Auswerteeinheit des miniaturisierten Mößbauerspektrometers (MIMOS II) mit höherer Auflösung der Geschwindigkeit.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1 & 2: Es sollen weitere Messungen an Proben der Projektteilnehmer vorgenommen werden.

AP3: Im Rahmen des nächsten Bearbeitungszeitraumes werden weitere Optimierungen der neuen Auswerteeinheit vorgenommen.

Das Steuerprogramm muss dahingehend geändert werden, dass mehrere Detektoren ausgelesen werden können, um Transmissions- und Reflexionsmessungen parallel vornehmen zu können.

Das Konzept der zweidimensionalen Datenaufnahme soll entsprechend auf mehrere Detektoren gleichzeitig angewendet werden.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |  | Förderkennzeichen: |
|--|--|--------------------|
| Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30   | 167 Hannover                           | 02 E 11870F        |
| Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F                           |  |                    |
| <b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3 |  |                    |
| Laufzeit des Vorhabens: Berichtszeitraum:  |  |                    |
| 01.01.2021 bis 31.12.2023  | 01.01.2021 bis 30.06.2021              |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | ntkosten des Vorhabens: Projektleiter: |                    |
| 254.261,00 EUR   | Dr. Dultz                              |                    |

In dem Vorhaben soll die Bewertung der Stabilität geotechnischer Bentonitbarrieren verbessert werden. Hierfür werden im Verbund mit weiteren Kooperationspartnern aufeinander abgestimmte experimentelle und analytische Arbeiten durchgeführt um ausgewählte Aspekte der Umwandlung von Bentonit im Kontakt mit Formationswässern der geologischen Barriere unter Endlagersystem-nahen Bedingungen zu untersuchen. Insbesondere wird die Auflösung von Carbonaten und CO<sub>2</sub>-Freisetzung, Entstehung von Acidität und Mechanismen der Protonenpufferung, Metallkorrosion in Kontakt mit Bentoniten und die Bedeutung der Adsorption von Fe an Kantenflächen der Tonminerale für deren Löslichkeit untersucht.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Auflösung von Carbonaten und CO<sub>2</sub>-Freisetzung

AP2: Acidität der Bentonite bei erhöhten Temperaturen

AP3: Lösungs- und Umwandlungsmechanismus der Smektite in Bentoniten

AP4: Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss

AP5: Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion auf atomarem Niveau

#### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die hochauflösende tomographische Untersuchung einer Bentonitprobe ergab, dass zusammen mit anschließender Bildbearbeitung Carbonate, Schwerminerale, weitere Mineralphasen und Poren separat zu erfassen sind. Damit ist die Voraussetzung für den Einsatz der Tomographie bei der Verfolgung der In-situ-Umwandlung von Carbonaten in Bentoniten gegeben. Da die Umwandlungsreaktion bei 120 °C in dem durch das tomographische In-situ-Experiment vorgegebenen Zeitraum nur anfänglich verfolgt werden kann, wurden Proben für die Untersuchung in einer Zeitreihe bis zu 1000 h präpariert. Um die Reaktion zu beschleunigen und die tomographische Untersuchung weiterführender auszulegen wurden Versuche mit Oxidationsmitteln aufgenommen. Hier ist absehbar, dass durch deren Einsatz weitergehende Informationen in dem vorgesehenen In-situ-Experiment erhalten werden können.

AP2: Vorversuche zur Entstehung von Acidität in den Bentoniten ergaben, dass alle fünf untersuchten Bentonite eine relativ hohe Pufferreaktivität gegenüber Protonen aufweisen. Um die Mineralreaktionen in Bentoniten, die zur Acidität beitragen, näher kennzeichnen

zu können, wurden zunächst Modellversuche mit Reinmineralen und einem Carbonatfreien Bentonit aus dem Westerwald aufgenommen. Hier konnte für sulfidische und oxidische Fe-Minerale die Versauerungsleistung und deren Reaktionskinetik beschrieben werden. Die Kapazität des Austauscherpuffers wurde durch die Bestimmung der Kationenaustauschkapazität und der austauschbaren Kationen gekennzeichnet. Zur Analyse des Beitrages der Säurepufferung durch verschiedene Silicate werden die Tonund Schlufffraktionen in jeweils drei Unterfraktionen separiert um diese anschließend einer Säurebelastung unterziehen zu können.

- AP3: Keine Arbeiten im Berichtszeitraum.
- AP4: Zur quantitativen Kennzeichnung der Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss wurde eine Routine zur systematischen Untersuchung der für die Prüfung eingesetzten Metallplättchen an einem konfokalen Laser Raster Mikroskop (CLSM) entwickelt. An einem übermittelten Probensatz, der die Bandbreite der Untersuchungen ohne und mit Zusatz von Mikroorganismen widergibt, wurden die Bestimmung von Rauigkeitsparametern auf den Prüfplättchen und die Höhenmessung zur Kennzeichnung und Quantifizierung von Korrosionsabläufen geprüft.
- AP5: Um die mögliche Zunahme der chemischen Stabilität von Smektit durch Adsorption von Fe-Ionen an die Kantenflächen in Laborversuchen analysieren zu können wurde die Eignung verschiedener Methoden geprüft. Der Gehalt an Tiron-löslicher amorpher Kieselsäure in den Bentoniten weist darauf hin, dass diese in deutlichen Mengen vorhanden ist und der Parameter `Si-Freisetzung' nicht einfach zur Kennzeichnung der Veränderung der Stabilität von den in den Bentoniten enthaltenen Smektiten genutzt werden kann. Stattdessen sollen Korngrößenfraktionen von primär entstandenen Glimmerminerale in die Belegungen mit Fe und anschließenden Perkolationsversuche zur Kennzeichnung der Stabilität eingesetzt werden.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Um die Reaktionskinetik der beteiligten Mineralphasen auch unter Zusatz von Oxidationsmitteln zu kennzeichnen, sind Versuche in Zeitreihen mit Modellmineralen geplant. Dabei werden die den Umsatz bestimmenden Lösungsparameter analysiert. Es soll der Beitrag verschiedener Mineralarten zur Zersetzung von Carbonaten abgeleitet werden. Aus den Ergebnissen soll auch der Zeitbedarf für einen weitgehenden Reaktionsfortschritt bestimmt werden, um die entsprechende Messzeit für den In-situ-Versuch abzuleiten.
- AP2: Die separierten Korngrößenfraktionen der Bentonite werden einer Säureextraktion unterzogen, um über die freigesetzten Mengen an Neutralkationen ihren Beitrag zu Protonenpufferreaktionen zu bestimmen. In den Korngrößenfraktionen der Bentonite sollen Schwerminerale separiert und nach Anreicherung eingehend auf ihre mineralogische Zusammensetzung untersucht werden.
- AP4: Aus den Korrosionsversuchen werden Metallplättchen erhalten, die mit der entwickelten Routinemethode am CLSM hinsichtlich der Veränderung der Oberflächenrauigkeit und der Volumenveränderung gekennzeichnet werden.
- AP5: Modellversuche zur Kantenbelegung von Glimmermineralen mit Fe werden aufgenommen, die Syntheseprodukte gekennzeichnet und in den Perkolationsversuch aufgenommen.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:   |                                    | Förderkennzeichen: |
|--|------------------------------------|--------------------|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   | GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln |                    |
| Vorhabensbezeichnung:  |                                    |                    |
| Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonita                              | aufsättigung (SII                  | RUB)               |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                                    |                    |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                       |                                    |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:                  |                    |
| 01.04.2021 bis 30.06.2023  | 01.04.2021 bis 30.06.2021          |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:                     |                    |
| 448.154,00 EUR   | Dr. Kröhn                          |                    |

Im Zusammenhang mit der Wasseraufnahme von Bentonit/-barrieren ist immer noch eine Reihe von Fragen offen. Den folgenden Fragen soll im Projekt SIRUB nachgegangen werden:

- Wie entwickelt sich die schmale, vollaufgesättigte Zone am Bentonit-Wasser-Kontakt? Motiviert durch Beobachtungen im Projekt EBS (FKZ 02E9430 (BMWA), GRS-199)
- Wie quillt Bentonit in einen begrenzt freien Raum?
   Motiviert durch Mitarbeit in der Task Force EBS, Projekt WiGru-9 (FKZ 02E11941 (BMWi), laufend) und einen Demonstrationsversuch mit Pellets im EU-Projekt BEACON
- Können Einheitsisothermen aus Montmorillonitgehalt und Kationentyp abgeleitet werden? Motiviert durch beobachtete Unterschiede in Na- und Ca-Bentonit, Projekt BIGBEN (FKZ 02E11284 (BMWi), GRS-615)
- Welche Endporositäten werden nach voller Aufsättigung mit Wasserdampf erreicht?
   Motiviert durch neuerliche Auswertung der Versuche im Projekt EBS (s. o.) im Projekt WiGru-7 (FKZ 02E11102 (BMWi), GRS-503)
- Mit welcher Dynamik wird Wasser aus Klüften im Kristallin in den Buffer eingetragen? Ergänzung der Task 8 "Buffer-Rock Interaction" der Task Forces EBS und GWFTS mit Blick auf die Fließvorgänge in einer Kluft, BMWi-Projekte E-DuR, WiGru-6, A-DuR, WiGru-7, QUADER (FKZ 02E10336, 02E10548, 02E10558, 02E11102 und 02E11213, GRS-430)

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP1: Vorbereitende Arbeiten
- AP2: Aufsättigung am Bentonit-Wasser-Kontakt
- AP3: Begrenzt freie Quellung
- AP4: Einheitsisothermen
- AP5: Endporosität nach der Aufsättigung über Dampf
- AP6: Interaktion von Grundwasser und Bentonit im Kristallin
- AP7: Erstellung des Abschlussberichts

Mit den vorbereitenden Arbeiten in AP1 wurde begonnen. Insbesondere wurde der 3D-Scanner beschafft und erste Tests bezüglich der Scangenauigkeit durchgeführt. Nachdem die Wartung für den 3D-Drucker aufgrund der späten Bewilligung ausgelaufen war, wurde ein neuer Vertrag verhandelt und abgeschlossen. Zudem wurden überaltete Verschleißteile ausgebaut und Ersatz beschafft und eingesetzt.

Das Feuchtemessgerät VSA, benötigt in AP4, zeigte nach längerem Stillstand unerwartete Fehlermeldungen, deren Ursache sich auch nach Durchführung einiger Tests nicht klären ließen. Recherchearbeiten zur Aktualisierung der Planung für den optischen Messplatz wurden durchgeführt.

Die Durchführung von Versuchen nach AP2 bis AP6 war noch nicht möglich.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung der notwendigen Beschaffungen
- Fortsetzung der Tests mit dem 3D-Scanner
- Inbetriebnahme des 3D-Druckers
- Vorbereitung und Aufbau der Messplätze
- Anfertigung von Messzellen
- Einschicken des Feuchtemessgeräts VSA
- Danach abschließender Test des Geräts und Beginn der Isothermenmessungen in AP4

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:  |                           | Förderkennzeichen: |
|---|---------------------------|--------------------|
| BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Per   | ine                       | 02 E 11890A        |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                    |
| Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A |                           |                    |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle  |                           |                    |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1  |                           |                    |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra            | um:                |
| 01.03.2021 bis 31.10.2023   | 01.03.2021 bis 30.06.2021 |                    |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                    |
| 393.063,82 EUR  | Jobmann                   |                    |

Das wesentliche Ziel dieses Vorhabens ist die Entwicklung und der Test eines erweiterten dreidimensionalen Hoek-Brown Stoffmodells, das in der Lage ist, anisotropes Festigkeitsverhalten sowohl innerhalb der intakten kristallinen Gesteinsmatrix als auch in einem mit mehreren Klüften in verschiedener Lage durchzogenen Gebirgskörper zu berücksichtigen. Es geht darum, die Grenzbedingung so zu formulieren, dass die festigkeitsreduzierenden Eigenschaften des jeweiligen Kluftsystems adäquat im Zuge des Integritätsnachweises berücksichtigt werden können.

Das neue Stoffmodell soll in zwei unterschiedliche Computercodes implementiert und getestet werden. Mit der Verwendung zweier Computercodes wird der Notwendigkeit Rechnung getragen, das Ungenauigkeiten, die sich aus der Verwendung unterschiedlicher Codes ergeben, abgebildet und im Hinblick auf anstehende Sicherheitsuntersuchungen bewertet werden können. Anhand der Ergebnisse, die mit dem neuen Stoffmodell erzielt werden, soll geprüft werden, ob die aktuelle Formulierung und Quantifizierung des Dilatanz-Kriteriums im Falle kristalliner Wirtsgesteine ausreichend ist, oder ob Änderungen bzw. Konkretisierungen mit Blick auf die Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens notwendig sind. Zur rechnerischen Abbildung des korrekten effektiven Spannungszustandes wird auch eine Berücksichtigung des Biot-Koeffizienten als hydromechanischer Kopplungsparameter im geklüfteten Gestein erfolgen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Gemäß den genannten Zielen, sind die Arbeiten in diesem Vorhaben in folgende Arbeitspakete aufgeteilt:

AP1: Entwicklung des anisotropen Stoffmodells

AP2: Laborversuche zur Eigenschaftsbestimmung

AP3: Implementierung und Test AP4: Anwendung und Bewertung

AP5: Dokumentation

Im Rahmen des Arbeitspaketes 1 wird ein Stoffmodell für kristalline Gesteine entwickelt, welches in der Lage ist, das anisotrope Festigkeitsverhalten von geklüfteten kristallinen Gestein mathematisch zu beschreiben. Dieses Stoffmodell basiert auf dem Modell von Hoek und Brown, die in den letzten ca. 15 Jahren ihr Modell primär aus praktischen Erfahrungen entwickelt haben, welches den Grad der Klüftigkeit in die Berechnungen zum Festigkeitsverhalten eines Hartgesteins einbezieht. Ein Nachteil des Hoek-Brown Ansatzes ist, dass es sich um ein isotropes Stoffmodell handelt. Dieser Nachteil soll durch das zu entwickelnde Stoffmodell insoweit überwunden werden, dass, in Ergänzung zu dem bisherigen Ansatz, man in die Lage versetzt wird, den Einfluss von Lage und der Orientierung von Klüften auf das Festigkeitsverhalten eines kristallinen Gesteins bestimmen zu können. Dies erhöht den Detaillierungsgrad künftiger Analysen zum mechanischen Verhalten geklüfteter Gesteine.

Zu diesem Zweck wurde im Berichtszeitraum eine detaillierte Literaturrecherche durchgeführt. Ziel war es, herauszufinden, welche Ansätze für eine Modifizierung des Hook-Brown Stoffmodells in der Literatur bisher verwendet bzw. entwickelt wurden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Auswertung der Ergebnisse der Literaturrecherche
- Festlegung eines Ansatzes für ein Stoffmodell zur weiteren Bearbeitung
- Konzeption eines Laborprogramms zur Parameterbestimmung

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |  | Förderkennzeichen:          |
|--|--|-----------------------------|
| Technische Universität Bergakademie Freiberg, Ak                               | tademiestr. 6,                                 | 02 E 11890B                 |
| 09599 Freiberg   |  | 02 E 11090B                 |
| Vorhabensbezeichnung:  |  |                             |
| Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erwei                               | terten Hoek-Bro                                | wn Stoffmodells zur Be-     |
| rücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens be                            | ei der Anwendui                                | ng der Integritätskriterien |
| für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B                           |  |                             |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |  |                             |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1                                     |  |                             |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitrau                                | ım:                         |
| 01.03.2021 bis 31.10.2023  | .2021 bis 31.10.2023 01.03.2021 bis 30.06.2021 |                             |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:                                 |                             |
| 294.776,55 EUR   | Prof. Dr. Konie                                | tzky                        |

Das Projekt beinhaltet die Entwicklung eines nichtlinearen elasto-plastischen Stoffgesetzes für die kristalline Matrix mit zuzüglich bis zu drei Schwächeflächen. Berücksichtigt werden weiterhin Erweichungsfunktionen für den Nachbruchbereich sowie eine hydraulische Kopplung in Form einer anisotropen Permeabilitätsentwicklung als Funktion der Schädigung inkl. einer Aktualisierung des Biot-Koeffizienten. Die Validierung des Stoffgesetzes erfolgt an diversen Laborversuchen. Die Anwendung konzentriert sich auf die Nutzung als Dilatanzkriterium für Sicherheitsuntersuchungen im Endlagerbereich.

Das Projekt wird in Kooperation mit der BGE TECHNOLOGY GmbH durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Projekt BARIK gliedert sich in 5 Arbeitspakete (AP).

AP1: Entwicklung Stoffmodell:

Entwicklung eines nichtlinearen elasto-plastischen Stoffgesetzes auf Basis der Hoek-Brown-Kriteriums unter Berücksichtigung von bis zu drei Schwächeflächen zuzüglich Gesteinsmatrix und strain-softening-Funktionen sowie die Kopplung des mechanischen Stoffgesetzes mit einem hydraulischen in Form anisotroper Permeabilitätsentwicklung auf Basis der mechanischen Schädigungsentwicklung.

AP2: Laborversuche:

Durchführung von rein mechanischen und HM-gekoppelten Laborversuchen zur Validierung des Stoffgesetzes (Matrix-Versuche, Kluft-Versuche, gekoppelte Versuche).

AP3: Implementierung und Test:

Umsetzung und Implementierung des entwickelten Stoffgesetzes in die zwei numerischen Computercodes FLAC3D von ITASCA und OpenGeoSys.

AP4: Evaluierung:

Evaluierung des Stoffgesetzes beim Einsatz als Dilatanzkriterium.

AP5: Dokumentation:

Zwischenzeitliche und abschließende Dokumentation aller Entwicklungen und Arbeiten sowie Datensicherung.

Fundierte Literaturrecherche und -aufbereitung zum Themenkomplex des theoretischen Ansatzes des modifizierten Hoek-Brown Stoffmodells sowohl für den mechanischen als auch hydraulischen Ansatz. Darauf aufbauend fand eine Erörterung von potentiellen Möglichkeiten zur Umsetzung des Stoffgesetzes statt, auf Basis dessen ein Konzept zur Umsetzung des Stoffgesetzes festgelegt wurde. Dieses Konzept umfasst den mechanischen Teil des Stoffgesetzes (AP1).

Aufstellen eines Planes bezüglich des Umfangs und Inhalts der laborativen Untersuchungen an kristallinem Gestein (Freiberger Gneis) (AP2). AP1 und AP2 wurden mit dem Projektpartner diskutiert und abgesprochen.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

Im weiteren Vorgehen wird im Rahmen des AP1 eine Möglichkeit der hydromechanischen Kopplung erörtert, um die Permeabilitätsentwicklung aufgrund von Schädigungen und den Einfluss des Biot-Koeffizienten auf das mechanische Verhalten respektive des effektiven Spannungszustandes abbilden zu können.

Parallel werden die geplanten Laborversuche zur Materialcharakterisierung durchgeführt (AP2).

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:   |   | Förderkennzeichen:        |  |
|--|---|---------------------------|--|
| BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 3  | BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine |                           |  |
| Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicherheit von Verschlusssystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)                                 |   |                           |  |
| <b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3 |   |                           |  |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra                                  | um:                       |  |
| 01.06.2021 bis 31.05.2023  | 01.06.2021 bis                                  | 01.06.2021 bis 30.06.2021 |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:                                  | Projektleiter:            |  |
| 479.325,30 EUR   | Herold  |                           |  |

Der Zugang zu einem Endlager in einer tiefen geologischen Formation bildet, wie auch im konventionellen Bergbau, ein entscheidendes Nadelöhr für den Betrieb solcher Anlagen. Durch die Tageszugänge werden alle Personal- und Materialströme bewegt, und es findet die Versorgung der untertägigen Anlage mit allen notwendigen Medien statt. Die direkte Verbindung zwischen der Biosphäre und den Grubenhohlräumen stellen einen potentiellen Zu- bzw. Austrittspfad von Fluiden nach Abschluss der Betriebsphase dar. Ihrem Verschluss kommt damit innerhalb des Multibarrierensystems eines Endlagers eine entscheidende Rolle zu. Mit dem dauerhaften Verschluss soll ein Zustand geschaffen werden, der dem natürlichen Isolationspotential der geologischen Barriere bzw. der hangenden Schutzschichten soweit wie möglich entspricht. Trotz dieser großen Bedeutung werden bei der Auswahl und der Gestaltung von Tageszugängen zumeist betriebliche, betriebssicherheitsrelevante und wirtschaftliche Kriterien berücksichtigt. Mit dem Vorhaben sollen die langzeitsicherheitsrelevanten Aspekte beim Verschluss von Tageszugängen untersucht und die beiden Grundkonzepte eines Schachtes oder einer Rampe verglichen werden, um so die für den Nachweis der Langzeitsicherheit relevanten Unterschiede zu identifizieren und zu bewerten. Schachtverschlusskonzepte sind für Endlager in unterschiedlichen Wirtsgesteinen bekannt; wohingegen Verschlusssysteme speziell für Rampen zunächst noch entwickelt werden müssen. Die Basis dafür bilden aus FuE-Vorhaben bekannte generische Standortmodelle, an denen bisher Schachtverschlüsse vorgesehen waren. Im Weiteren ist die bautechnische Machbarkeit von Rampenverschlüssen zu bewerten und eine Methode zum Vergleich der Verschlusssysteme sowie deren Verschlussvermögen zu entwickeln. Die Methode wird für den Vergleich von Schächten und Rampen innerhalb eines Endlagersystems bzw. Wirtsgesteins angewendet. Die Analyse dient dem Vergleich der Systeme und wird eine zusätzliche Entscheidungsgrundlage für die Wahl der Tageszugänge schaffen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Verschlusskonzepte

AP2: Entwicklung einer Methodik zum Vergleich

AP3: Nachweis des Verschlussvermögens

AP4: Vergleich und Bewertung

AP5: Berichtswesen

AP1: Als erste Schritte im Vorhaben wurden die bereits existierenden Verschlusskonzepte zusammengefasst. Es sollen insgesamt 8 Endlagersysteme betrachtet werden (Salz – steile Lagerung, Salz – flache Lagerung, Ton – mächtig, Ton – geringmächtig, Kristallin – KBS3-Konzept, Kristallin – multipler ewG, Kristallin – Salz als überlagernder ewG, Kristallin – Ton als überlagernder ewG). Für diese 8 Endlagersysteme bestehen bereits Schachtverschlusskonzepte. Rampenverschlüsse sind für Kristallin bekannt. Die Zusammenfassung beinhaltet die Beschreibung der technischen Planung und die berücksichtigten (Sicherheits-) Anforderungen.

Im Weiteren wurde eine Literaturrecherche zum Vergleich von qualitativen und quantitativen Kriterien sowie zu Sensitivitätsanalysen und Parameterstudien im Kontext von Verschlussbauwerken für ein Endlager begonnen.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Die Zusammenfassung der bekannten Konzepte für die 8 Endlagersysteme wird abgeschlossen. Es wird ein einheitlicher Anforderungskatalog entwickelt. Auf Basis dessen werden noch nicht vorhandene und für den Verglich benötigte Verschlusskonzepte entwickelt. Der spätere Vergleich wird stets an Schacht und Rampe in einem Endlagersystem erfolgen. Die bekannten generischen geologischen Modelle der Schächte werden auch für die Rampen genutzt.
- AP2: Die Entwicklung geeigneter Bewertungsmaßstäbe und einer Methode zum Vergleich der Systeme beginnt mit einer Spezifikation der Einwirkungen und der Durchführung von Parameterstudien in den verschiedenen Konzepten zur Identifizierung der für die Funktionsfähigkeit der Verschlusssysteme wesentlichen Einflussgrößen bzw. sensitiven Parameter. Die Parameterstudien werden an einer Vorbemessung der Verschlusssysteme vorgenommen. Dazu ist eine möglichst standardisierte Methode zur Vorbemessung vorzubereiten.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen:       |
|--|---------------------------|--------------------------|
| Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bar  | utzner Landstr.           | 02 E 11911A              |
| 400, 01328 Dresden   |                           | 02 E 11911A              |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                          |
| Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radi  | ionuklidsorption          | auf Kluft- und Störungs- |
| flächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver |                           |                          |
| Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A   |                           |                          |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle             |                           |                          |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                                   |                           |                          |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra            | um:                      |
| 01.04.2021 bis 31.03.2024  | 01.04.2021 bis 30.06.2021 |                          |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                          |
| 253.632,00 EUR   | Dr. Fischer               |                          |

Übergeordnetes Ziel des Verbundprojektes ist die Erarbeitung einer verallgemeinerungsfähigen Parametrisierung reaktiver Transportmodelle in geklüfteten Kristallingesteinen. Diese Parametrisierung soll es erlauben, den quantitativen Einfluss der Mikrometer- und Submikrometerrauheit von Kluft- und Störungsflächen in kristallinen Wirtsgesteinen in reaktiven Transportmodellen zu berücksichtigen. Die Anwendung dafür liegt in der verbesserten Vorhersagbarkeit von Radionuklidmigration und -rückhalt in Simulationsrechnungen.

Die Verbesserung der Zusammenarbeit zwischen deutschen und russischen universitären und außeruniversitären Forschungsinstitutionen auf diesem Gebiet ist ein weiteres Ziel des skizzierten Vorhabens. Die Nachwuchsförderung und der resultierende Kompetenzerhalt sollen mit dem geplanten Forschungsprojekt gestützt werden. Die kontinuierliche inhaltliche Einbindung in internationale Vorhaben und Verbünde stellt die wissenschaftlich-technische Aktualität auf dem Gebiet der Radio(geo)chemie und nuklearen Entsorgung auch im nationalen Rahmen sicher. Dafür sind im Rahmen dieses Verbundprojektes gemeinsam mit der Lomonossow-Universität (Moskau) Aufenthalte junger Wissenschaftler an Institutionen in Europa und Russland mit Fokus auf deren Karriereentwicklung durch aktive Teilnahme an Tagungen und Seminaren geplant.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Mineralogisch-geochemische und oberflächenanalytische Charakterisierung der Kluftund Störungsoberflächen
- AP2: Heterogene Oberflächenreaktivität: Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Sorptionseffizienz
- AP3: Parametrisierung und Validierung der reaktiven Transportmodelle, basierend auf experimenteller Analyse des Transportverhaltens und der Oberflächenreaktivität
- AP4: Nachwuchsförderung und internationaler Austausch

Am 7.5. fand das erste trilaterale Online-Meeting zwischen den Partnern der Lomonossow-Universität (MSU, Владимир Петров, Ирина Власова & Анастасия Родионова), der Friedrich-Schiller-Univ. Jena (FSU, Thorsten Schäfer) und HZDR (C. Fischer) statt. Dabei wurde mit Schwerpunkt der Aspekt der Bandbreite der Probenmaterialien (kristalline Gesteine, Granite) unterschiedlicher Herkunft, die Verwendung spezifischer analytischer Verfahren sowie die Verwendung numerischer Methoden besprochen und erste Schritte geplant. Vom Projekt-Partner MSU wurden weiterhin Informationen zu den bereits erfolgten Untersuchungen an russischen Kristallingesteinen zur Verfügung gestellt.

Mehrere bilaterale Onlinetreffen mit der FSU Jena wurden für die konkretere Planung von Beprobungen durchgeführt. Zwei Regionen, (i) Lausitzer Block, (ii) Erzgebirge wurden für die in Kürze anstehende Beprobung identifiziert. Der Fokus der Beprobung soll auf Kluft- und Störungszonen mit Spuren von Alterationsprozessen (Verwitterung, hydrothermale Überprägung) liegen. Ein weiterer Fokus ist auf die Alteration von Feldspatkristallen im Gestein gerichtet. Hier stehen Anlösungsstrukturen (Ätzgruben) bzw. Schichtsilikatneubildungen (Illitisierungen, Kaolinisierungen) in Feldspatkristallen im Zentrum der Beprobungsstrategie.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Eine erste gemeinsame Beprobung in Steinbrüchen des Lausitzer Blocks ist für Mitte Juli 2021 geplant. Danach werden dünnschliffpetrografische Untersuchungen sowie oberflächenanalytische Untersuchungen durchgeführt. Diese bilden die Grundlage für erste Segmentierungsarbeiten der Geometrien für Transportmodelle.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |  | Förderkennzeichen:         |  |
|--|--|----------------------------|--|
| Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben                             | 1, 07743 Jena                                | 02 E 11911B                |  |
| Vorhabensbezeichnung:  |  |                            |  |
| Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radi                                | ionuklidsorption                             | auf Kluft- und Störungs-   |  |
| flächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierur                             | ng und Validieru                             | ing verbesserter reaktiver |  |
| Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B                                   | Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B |                            |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |  |                            |  |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3                       |  |                            |  |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra                               | um:                        |  |
| 01.04.2021 bis 31.03.2024  | 01.04.2021 bis 30.06.2021                    |                            |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:                               |                            |  |
| 249.905,00 EUR   | Prof. Dr. Schäfe                             | er                         |  |

Übergeordnetes Ziel des Verbundprojektes ist die Erarbeitung einer verallgemeinerungsfähigen Parametrisierung reaktiver Transportmodelle in geklüfteten Kristallingesteinen. Diese Parametrisierung soll es erlauben, den quantitativen Einfluss der Mikrometer- und Submikrometerrauheit von Kluft- und Störungsflächen in kristallinen Wirtsgesteinen in reaktiven Transportmodellen zu berücksichtigen. Die Anwendung dafür liegt in der verbesserten Vorhersagbarkeit von Radionuklidmigration und -rückhalt in Simulationsrechnungen.

Die Verbesserung der Zusammenarbeit zwischen deutschen und russischen universitären und außeruniversitären Forschungsinstitutionen auf diesem Gebiet ist ein weiteres Ziel des skizzierten Vorhabens. Die Nachwuchsförderung und der resultierende Kompetenzerhalt sollen mit dem geplanten Forschungsprojekt gestützt werden. Die kontinuierliche inhaltliche Einbindung in internationale Vorhaben und Verbünde stellt die wissenschaftlich-technische Aktualität auf dem Gebiet der Radio(geo)chemie und nuklearen Entsorgung auch im nationalen Rahmen sicher. Dafür sind im Rahmen dieses Verbundprojektes gemeinsam mit der Lomonossow-Universität (Moskau) Aufenthalte junger Wissenschaftler an Institutionen in Europa und Russland mit Fokus auf deren Karriereentwicklung durch aktive Teilnahme an Tagungen und Seminaren geplant.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Mineralogisch-geochemische und oberflächenanalytische Charakterisierung der Kluftund Störungsoberflächen
- AP2: Heterogene Oberflächenreaktivität: Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Sorptionseffizienz
- AP3: Parametrisierung und Validierung der reaktiven Transportmodelle, basierend auf experimenteller Analyse des Transportverhaltens und der Oberflächenreaktivität
- AP4: Nachwuchsförderung und internationaler Austausch

Am 7.5. fand das erste trilaterale Online-Meeting zwischen den Partnern der Lomonossow-Universität (MSU, Владимир Петров, Ирина Власова & Анастасия Родионова), der Friedrich-Schiller-Univ. Jena (FSU, Thorsten Schäfer) und HZDR (C. Fischer) statt. Dabei wurde speziell der Aspekt der Bandbreite der Probenmaterialien (kristalline Gesteine, Granite) unterschiedlicher Herkunft, die Verwendung spezifischer analytischer Verfahren sowie die Verwendung numerischer Methoden besprochen und erste Schritte geplant. Vom Projekt-Partner MSU wurden weiterhin Informationen zu den bereits erfolgten Untersuchungen an russischen Kristallingesteinen zur Verfügung gestellt.

Die Anstellung von Doktoranden bei den deutschen Projektpartnern war ein weiteres hier besprochenes Thema. Während an der FSU Jena eine Kandidatin nach Abschluss der MSc-Arbeit für die Mitarbeit im Projekt zur Verfügung steht, musste am HZDR eine Ausschreibung für die Promotionsstelle erfolgen. Die Ausschreibung erfolgte Mitte Mai 2021 und ein positives Ergebnis lag Anfang Juli vor mit einer Kandidatin, die im Sommer ihre Masterarbeit abschließen sollte. Aus gesundheitlichen Gründen ist der MSc-Abschluss lt. ihrer Aussage gefährdet und sie hat kürzlich ihre Bewerbung zurückgezogen, weshalb wir eine neue Ausschreibung starten müssen.

Mehrere bilaterale Onlinetreffen zwischen der FSU Jena und dem HZDR wurden für die konkretere Planung von Beprobungen durchgeführt. Zwei Regionen, (i) Lausitzer Block, (ii) Erzgebirge wurden für die in Kürze anstehende Beprobung identifiziert. Der Fokus der Beprobung soll auf Kluft- und Störungszonen mit Spuren von Alterationsprozessen (Verwitterung, hydrothermale Überprägung) liegen. Ein weiterer Fokus ist auf die Alteration von Feldspatkristallen im Gestein gerichtet. Hier stehen Anlösungsstrukturen (Ätzgruben) bzw. Schichtsilikatneubildungen (Illitisierungen, Kaolinisierungen) in Feldspatkristallen im Zentrum der Beprobungsstrategie.

Methodisch vorbereitenden Arbeiten zur Charakterisierung von Kluftfüllmaterialien mittels µXRF in Kombination mit LA-ICP-MS wurden an schwedischen Kristallinproben in Kollaboration mit der Luneus Universität (Dr. Henrik Drake) durchgeführt. Anhand der erhobenen Daten wurde ein Manuskript zur Publikation mit Fokus auf Flüssig-/Festphasen Verteilung von Seltenenerdenelementen und Spurenelementen zwischen Formationswässern und Kluftfüllungen im geochronologischen Kontext erstellt.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Eine erste gemeinsame Beprobung in Steinbrüchen des Lausitzer Blocks ist für Mitte Juli 2021 geplant. Eine zweite gemeinsame Beprobung in Steinbrüchen des Erzgebirges ist für Mitte September des selben Jahres angesetzt. Danach werden dünnschliffpetrografische Untersuchungen sowie oberflächenanalytische Untersuchungen durchgeführt. Diese bilden die Grundlage für erste Segmentierungsarbeiten der Geometrien für Transportmodelle.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

geplant: Kusturica, A., van Laaten, N., Drake, H., Schäfer, T. (2021, to be submitted): LA-ICP-MS analysis of trace and rare earth elements in carbonate fracture fillings from Granitoid Rocks (Sweden), Environ. Sci. Technol.

| Zuwendungsempfänger:                                     |  | Förderkennzeichen:       |  |
|--|--|--------------------------|--|
| Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johner            | Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Str., 52428                      |                          |  |
| Jülich   |  | 02 E 11921A              |  |
| Vorhabensbezeichnung:                                    |  |                          |  |
| Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation            | von AMericium  | aus hochradioaktiven Ab- |  |
| falllösungen (SEPAM), Teilprojekt A                      |  |                          |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschun                | Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                          |  |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.1 |  |                          |  |
| Laufzeit des Vorhabens: Berichtszeitraum:                |  |                          |  |
| 01.04.2021 bis 31.03.2024                                | 01.04.2021 bis 30.06.2021  |                          |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:                              | Projektleiter:   |                          |  |
| 254.678,00 EUR   | Dr. Modolo   |                          |  |

Das Gesamtziel des beantragen Projektes "Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM)" ist die wissenschaftliche Untersuchung und Weiterentwicklung von Extraktionsprozessen sowie der grundlegenden Chemie zur Abtrennung von Americium aus hochradioaktiven Abfällen. Ein weiterer wesentlicher Aspekt des Projektes ist die Ausbildung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses im Bereich der Nuklearen Sicherheitsforschung und Nuklearchemie im Allgemeinen und in Themen der Actinidenchemie im Besonderen. Durch eine internationale Ausrichtung des Projekts werden aktuelle Entwicklungen im Ausland berücksichtigt. Somit leistet das Projekt einen wichtigen Beitrag zum Aufbau, der Weiterentwicklung und dem Erhalt wissenschaftlich-technischer Kompetenz in der nuklearen Sicherheitsforschung.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Projekt wird in vier Arbeitspaketen bearbeitet:

AP1: Grundlagen Koordinations- und Extraktionschemie

AP2: Prozessrelevante Optimierungen AP3: Modellierung und Prozesstests

AP4: Nachwuchsförderung

Zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses im Bereich der Nuklearen Sicherheitsforschung, Nuklearchemie bzw. Actinidenchemie ist die Einstellung einer Doktorandin/eines Doktoranden vorgesehen. Eine entsprechende Stellenausschreibung wurde veröffentlicht.

Der Entwurf einer Kooperationsvereinbarung wurde erstellt und wird zwischen den Verbundpartnern zum Abschluss gebracht.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Im folgenden Berichtszeitraum wird die Promotionsstelle besetzt und mit der Einarbeitung der Doktorandin/des Doktoranden und Bearbeitung des Untersuchungsprogramms begonnen.

Eine Kick-Off Veranstaltung wird durchgeführt, wobei bedingt durch die COVID-19 Pandemie das Format (Online oder Präsenz) noch unklar ist.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |  |
|--|---------------------------|--------------------|--|
| Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für                            |                           | 02 E 11921B        |  |
| Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eg-                          |                           | 02 E 11921B        |  |
| genstein-Leopoldshafen   |                           |                    |  |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |  |
| Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Ab- |                           |                    |  |
| falllösungen (SEPAM), Teilprojekt B  |                           |                    |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle       |                           |                    |  |
| Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.1                             |                           |                    |  |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:         |                    |  |
| 01.04.2021 bis 31.03.2024  | 01.04.2021 bis 30.06.2021 |                    |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |  |
| 250.000,00 EUR   | Dr. Geist                 |                    |  |

Das Gesamtziel des beantragen Projektes "Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM)" ist die wissenschaftliche Untersuchung und Weiterentwicklung von Extraktionsprozessen sowie der grundlegenden Chemie zur Abtrennung von Americium aus hochradioaktiven Abfällen. Ein weiterer wesentlicher Aspekt des Projektes ist die Ausbildung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses im Bereich der Nuklearen Sicherheitsforschung und Nuklearchemie im Allgemeinen und in Themen der Actinidenchemie im Besonderen. Durch eine internationale Ausrichtung Projekts werden aktuelle Entwicklungen im Ausland berücksichtigt. Somit leistet das Projekt einen wichtigen Beitrag zum Aufbau, der Weiterentwicklung und dem Erhalt wissenschaftlich-technischer Kompetenz in der nuklearen Sicherheitsforschung.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Grundlagen Koordinations- und Extraktionschemie

AP2: Prozessrelevante Optimierungen AP3: Modellierung und Prozesstests

AP4: Nachwuchsförderung

Die Stelle konnte bislang nicht besetzt werden, weshalb noch keine Arbeiten durchgeführt werden konnten.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Es sollen wasserlösliche Bis-triazinyl-bipyridine und/oder Bis-triazolyl-bipyridine als selektive Komplexierungsmittel für Am(III) synthetisiert werden. Sofern die Arbeiten von Lomonosov Vorschläge für vielversprechende Strukturen ergeben, soll deren Synthese geplant werden.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Auftragnehmer:   |                           | Förderkennzeichen: |  |
|--|---------------------------|--------------------|--|
| GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln   |                           | 02 E 11941         |  |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |  |
| Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern |                           |                    |  |
| (WiGru-9)  |                           |                    |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                           |                    |  |
| Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2                                     |                           |                    |  |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:         |                    |  |
| 01.05.2021 bis 30.06.2022  | 01.05.2021 bis 30.06.2021 |                    |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |  |
| 564.085,00 EUR   | Dr. Noseck                |                    |  |

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

#### TA1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

- Verfolgung und Bewertung internationaler Entwicklungen zu offenen Fragen und zur Weiterentwicklung von Strategien und methodischen Vorgehensweisen bei einem Safety Case inklusive Kommunikation und Wissenserhalt und Einbringung nationaler Interessen in internationale Aktivitäten, insbesondere durch Mitarbeit in internationalen Arbeitsgruppen der OECD/NEA.
- Diskussion von eigenen und externen Ergebnissen in nationalen Diskussionsforen zur Erarbeitung gemeinsamer Stellungnahmen und Vorgehensweisen zu ausgewählten Themen der Endlagerung in Deutschland.
- Auswertung neuer wissenschaftlicher Ergebnisse und Aufbereitung zur Verwendung in Instrumentarien für Langzeitsicherheitsanalysen.

#### TA2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

- Vergleich der Ansätze und Herangehensweisen verschiedener Länder zur Bewertung der Langzeitsicherheit von Endlagern und Weiterentwicklung der eigenen Ansätze. Schwerpunkte sind Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen, Benchmark-Rechnungen sowie die Erstellung State-of-the-art-Berichten für Endlager in Salzformationen.
- Modellentwicklung zur Bentonitaufsättigung und Untersuchung der Auswirkungen von Permafrost auf Strömungsvorgängen in geklüfteten Medien mit Laborexperimenten und begleitenden Modellrechnungen.

#### TA 1:

- Teilnahme an einem virtuellen Treffen der IGSC Core Group zur Planung des Jahrestreffens der IGSC in der Schweiz. Teilnahme an einem Bureau Meeting der Arbeitsgruppe Information, Data and Knowledge Management (IDKM) zur Planung der Topical Session zum Thema "IDKM Timescales". Durchführung eines Workshops zusammen mit BGE zur Anwendung Identifikation der für den Set of Essential Records (SER) relevanten Unterlagen im Rahmen der Expertengruppe EGAR.
- Teilnahme an Online-Meetings des Salt Club und des Deutsch-Amerikanischen Workshops.
- Leitung des 4. CRC Plenary Meetings, inkl. Topical Session zum Thema "Transfer of data for the compilation of both descriptive and safety assessment models".

#### TA 2:

- Planung weiterführender Arbeiten zur Analyse von Modellsystemen anderer Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA).
- Durchführung von Vergleichsrechnungen für ein Endlager im Salzgestein im internationalen Vorhaben DECOVALEX 2023, Task F.
- Bearbeitung eines State-of-the-art-Berichts zu Szenarien in Salzgestein mit SNL, COVRA, RWM und BGETEC.
- Die Einfrierversuche aus WiGru-8 wurden fortgesetzt und in technischen Details verbessert.
- Zur Zusammenarbeit mit DTU hat ein erstes Abstimmungsgespräch stattgefunden.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

#### TA 1:

- Teilnahme an Treffen der IGSC Core Group mit Vorbereitung der Umfrage zur zukünftigen Ausrichtung der IGSC. Teilnahme am jährlichen Treffen der IGSC und an dem gemeinsamen Topical Session mit FSC zum Thema Uncertainties.
- Teilnahme an Sitzungen der IDKM und EGAR-Bureaus, an den Arbeitstreffen von EGAR sowie an der IDKM Topical Session zum Thema IDKM Timescales.
- Teilnahme am Online-Meeting der Task Force on EBS.
- Zusammenfassung des CRC Webinars vom Frühjahr 2021, Planung des nächsten Bureau Meetings und Planung der weiterführenden Arbeiten gemäß PoW 2021-2022.

### TA 2:

- Weiterführung der Analyse von Modellsystemen anderer Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA). Durchführung von Sensitivitätsanalysen auf komplexere Modellsysteme anhand vorhandener Datensätze mit verschiedenen Verfahren. Auswertung und Diskussion von Ergebnissen im internationalen Kreis.
- Weiterführung von Vergleichsrechnungen für ein Endlager im Salzgestein im internationalen Vorhaben DECOVALEX 2023, Task F.
- Fortsetzung der Einfrierversuche und der Arbeiten zur Portierung des nichtisothermen VIPER-Konzepts nach COMSOL.
- Zur Überprüfung der Methodik zum Import geologischer Daten wird ein erstes Prinzipmodell zum Standort Dreenthe erstellt.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

2.2 Vorhaben Bereich D1 – D3

| Zuwendungsempfänger:  |                           | Förderkennzeichen: |  |
|---|---------------------------|--------------------|--|
| Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser                  |                           | 02 E 11789         |  |
| Str. 173, 79100 Freiburg  |                           | 02 E 11707         |  |
| Vorhabensbezeichnung:   |                           |                    |  |
| Wegemanagement bei der Entsorgung hoch radioaktiver Abfälle in Deutschland (WERA) |                           |                    |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle    |                           |                    |  |
| Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1                            |                           |                    |  |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitraum:         |                    |  |
| 01.06.2019 bis 31.08.2021   | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:            |                    |  |
| 312.050,42 EUR  | Dr. Chaudry               |                    |  |

Das Projekt verfolgt das Ziel, Handlungsoptionen und Handlungsbedarfe in Bezug auf die Entsorgungswege für abgebrannte Brennelemente und hochradioaktive Abfälle aufzuzeigen. Es will damit eine Basis schaffen, die Integration der verschiedenen Entsorgungsschritte (Zwischenlagerung, Konditionierung, Transporte bis hin zur Endlagerung) aktiv zu gestalten. Außerdem sollen Aufgaben und Ziele für zukünftige Forschungs- und Entwicklungsmaßnahmen sichtbar gemacht und eine Grundlage für wirtschaftliche Betrachtungen im Zuge zukünftiger Konkretisierungen der Entsorgungswege geschaffen werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

WERA ist in vier Arbeitspakete gegliedert:

AP1 widmet sich der systematischen Zusammenstellung von relevanten Bausteinen der Entsorgung hoch radioaktiver Abfälle. Analog zu den bei der Langzeitsicherheitsanalyse eingeführten FEP-Katalogen entsteht auf diese Weise ein Baukasten, der zur Ableitung von Entsorgungsszenarien dient.

In AP2 werden aus den Bausteinen Entsorgungsszenarien von der Zwischenlagerung bis zur Endlagerung beschrieben. Dabei wird zunächst eine größere Anzahl an grundsätzlich plausiblen Szenarien entworfen.

In AP3 werden aus der so entstehenden größeren Anzahl an Szenarien drei repräsentative Szenarien für eine detailliertere Analyse ausgewählt. Für diese Szenarien werden die zu erwartenden Abläufe und Schnittstellen beschrieben und relevante Einflussgrößen identifiziert.

In AP4 werden die Erkenntnisse in einem Stakeholder-Workshop diskutiert, der mit einem Arbeitspapier vorbereitet wird. Die Ergebnisse fließen dann in den Abschlussbericht ein, in dem auch Vorschläge für zukünftige Forschungs- und Entwicklungsaufgaben adressiert werden.

AP1: Das Arbeitspaket 1 und Arbeitspaket 2 sind abgeschlossen. Im Berichtszeitraum wurden in AP1 nur geringe Ergänzungen und Korrekturen vorgenommen, die sich aus der Bearbeitung von AP2 und 3 ergaben.

AP2: In AP2 wurden im Berichtszeitraum noch wenige Anpassungen und Ergänzungen vorgenommen. So wurden bspw. Szenarien zur Rückholung eingelagerter Gebinde aus einem Endlager in die Betrachtung aufgenommen. Das festgelegte Referenzszenarium wurde in einigen Punkten präzisiert. Durch den Projektpartner BGE TECHNOLOGY wurden die entwickelten Szenarien einer kritischen Plausibilitätsprüfung unterzogen. Das Arbeitspaket 2 ist damit abgeschlossen.

AP3: Im AP3 wurden Kriterien diskutiert und festgelegt, anhand derer aus den als plausibel erachteten Szenarien eine Auswahl zur Analyse getroffen wurde. Das Referenzszenarium sowie zwei abweichende Szenarien wurden ausführlich beschrieben. Die Analyse der abweichenden Szenarien ist weitgehend abgeschlossen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im Berichtszeitraum 2/2021 sind folgende Arbeiten geplant:

- Abschluss der Szenarienanalyse im Rahmen von AP3
- Durchführung des Stakeholder-Workshops (AP4) als Online-Veranstaltung
- Aufbereitung der Ergebnisse des Stakeholder-Workshops und Übernahme in den Abschlussbericht
- Abschluss der Arbeiten von WERA
- Fertigstellung des Abschlussberichts

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |  |
|--|---------------------------|--------------------|--|
| Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer  | -Str. 2a,                 | 02 E 11849A        |  |
| 38678 Clausthal-Zellerfeld   |                           | 02 E 11649A        |  |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |  |
| Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in |                           |                    |  |
| Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A  |                           |                    |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle         |                           |                    |  |
| Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1                                 |                           |                    |  |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:         |                    |  |
| 01.10.2019 bis 30.09.2024  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |  |
| 3.003.244,00 EUR   | Prof. Dr. Röhlig          | g                  |  |

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Im TAP SAFE wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case (SC) anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern. Das Institut für Endlagerforschung IELF koordiniert das TAP und bearbeitet mit weiteren Partnern die Module "Analyse", "Synthese und Konzept", "Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung", "Ergebnisdarstellung von Modellrechnungen" sowie "Berichterstattung und Empfehlungen". Der Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik LfDG leistet Forschungsarbeiten in den Modulen "Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung" und "Analyse des langzeitigen Systemverhaltens von Tiefenlagern". Der Arbeitsschwerpunkt der risicare GmbH (im Unterauftrag) ist das Thema "Ungewissheiten". In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST, in dem der LfDG zu Fragen des Monitorings forscht.

Das IELF koordiniert gemeinsam mit dem ITAS das Verbundvorhaben sowie die Außenkommunikation.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Nachfolgend werden die Arbeitsinhalte für das gesamte Verbundvorhaben dargestellt. Zur Zuordnung der Arbeiten zu den Vorhabenpartnern wird auf die Vorhabenbeschreibung verwiesen.

<u>Modul SAFE 1:</u> Analyse: Desk research; Literaturstudie zu Ungewissheiten; Zusammenstellung zu Szenarien; Zusammenstellung von Botschaften und Informationen sowie deren Darstellungen (Indikatoren, Abbildungen) <u>Modul SAFE 2:</u> Synthese und Konzept: Synthese Modul 1: Gemeinsamkeiten, Schnittmengen; Konzepte und Wahrnehmung von Ungewissheiten; Methodisches Konzept für eine fokussierte empirische Untersuchung

Modul SAFE 3: Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung

Modul SAFE 4: Ergebnisdarstellung von Modellrechnungen, Indikatoren, Ungewissheiten

Modul SAFE 5: Analyse des langzeitigen Systemverhaltens von Tiefenlagern

Modul SAFE 7: Lösungsorientierte Berichterstattung und Empfehlungen

Modul TRUST 4: Analyse des Tiefen-/Endlagerverhaltens im Monitoringzeitraum anhand von numerischen TH2M-gekoppelten Simulationen: Literaturanalyse; Interaktiver Aufbau einer Gesprächsbasis mit der AGBe; Exemplarische Analyse des offenen/versetzten Tiefen-/Endlagerverhaltens im Monitoringzeitraum anhand von numerischen TH2M-gekoppelten Simulationen; Diskursiver Dialog mit der AGBe zur Identifizierung von Anforderungen an die Ausgestaltung von als vertrauenswürdig angesehenen Monitoringprogrammen; Rückspiegelung an außerwissenschaftliche Akteure/AGBe; Aufbau einer Plattform zur Visualisierung und Illustration von Simulationsergebnissen.

Die Arbeiten im Gesamtvorhaben sowie in den TAP wurden entsprechend der für Covid-19-Bedingungen entwickelten Szenarien fortgesetzt. Eine Mitarbeiterin befand sich in Elternzeit mit anschließender Arbeitszeitreduktion auf 35 %; in Folge dessen erfuhr ein Mitarbeiter eine Aufstockung von 50 % auf 70 %.

<u>IELF (Koordination und Kommunikation):</u> In Zusammenarbeit mit der TU Braunschweig wurden ein TRANSENS-Arbeitstreffen und in dessen Rahmen eine Teamleitersitzung im März als mehrtägige Videokonferenz organisiert. Konzepte zur Außenkommunikation von TRANSENS wurden ebenso wie die Homepage weiterentwickelt. Die TRANSENS-interne Online-Datenbank zur Sammlung der Veröffentlichungen wurde zur Nutzung freigeschaltet. Die ersten drei TRANSENS-Berichte wurden vorbereitet sowie redaktionell und organisatorisch zur Open-Access-Veröffentlichung gebracht. Die Zusammenarbeit mit dem Beirat TD wurde intensiviert und ein regelmäßiger Jour fixe eingerichtet. Ein Austausch mit dem BASE zur Ausgestaltung der Fachkonferenz Teilgebiete mündete in Absprachen zu zukünftigen Gesprächsformaten.

<u>IELF (TAP SAFE)</u>: Ein TAP-Treffen wurde organisiert, durchgeführt und ausgewertet. Die Arbeit am Meilenstein 2 aus dem TAP-Modul 1 ist vorangeschritten: Die Literaturstudie ist abgeschlossen, die Dokumentation liegt im Entwurf vor. Zum TAP-Modul 3 wurde in Kooperation mit dem TdLab der ETH Zürich ein Training zur Erhöhung der Methodenkompetenz durchgeführt. Darauf aufbauend wurden Planungen für die Zusammenarbeit mit der AGBe im 2. Halbjahr 2021, insb. zu den vorgesehenen Fallbeispielen und TD-Formaten (Meilenstein 4), durchgeführt und abgestimmt. Im TAP-Modul 4 begann die Sichtung von Darstellungs- und Schnittstellengestaltungsmöglichkeiten insb. mit Blick auf unsichere Parameter und Ergebnisse. Auch eine Studienarbeit "Fehleranalyse eines Radionuklid-Migrationsprozess-Modells" wurde durchgeführt.

LfDG: Ausgehend von den TM- Simulationen am reduzierten Lokalmodell für das Wirtsgestein Steinsalz (FLAC<sup>3D</sup> 7.0) wurden THM-Simulationen mittels des FTK-Simulators durchgeführt. Darüber hinaus wurden mechanische Simulationen an den Lokalmodellen durchgeführt. Drei weitere geometrische Modelle für das Wirtsgestein Tonstein wurden entwickelt. Im TAP TRUST wurde eine Website zur Information und Förderung des transdisziplinären Diskurses mit der AGBe aufgebaut. Ein erster Workshop mit der AGBe zu der Thematik Monitoring und Vertrauen wurde durchgeführt und die Erkenntnisse in einem Kurzbericht festgehalten. Im TAP SAFE wurden in Kooperation mit UK-A&O menschliche Faktoren bei numerischen Simulationen untersucht. Darüber hinaus wurde an der Darstellung des sicherheitstechnischen Einflusses eines 2-Sohlen-Endlagerbergwerks in Form von Differenzen-Plots gearbeitet. Für die Visualisierung von Zustandsgrößen wurde auf die entwickelte Website zurückgegriffen und der Bereich "Simulationsergebnisse" aufgebaut.

<u>risicare:</u> Die als Teil von Modul 1 des TAP SAFE vorgesehene Literaturstudie zu Ungewissheiten im Safety Case wurde im Februar 2021 als erster und eine weiterführende Studie zu anthropogenen Ungewissheiten im Juni 2021 als dritter TRANSENS-Bericht veröffentlicht. Darüber hinaus umfassten die Arbeiten insb. die Koordination des TAP-übergreifenden Themas Ungewissheiten sowie Mitarbeit im Sprecherteam und bei Veranstaltungen.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

<u>IELF (Koordination und Kommunikation)</u>: Im Anschluss an den Berichtszeitraum finden die Begleitung des von der LUH organisierten TRANSENS-Projekttreffens vom 19.–21.7. sowie die Organisation von Teamleitersitzungen statt. Weitere Treffen werden geplant, insb. das TRANSENS-Arbeitstreffen an der TU Berlin vom 6.–8.10.2021. Newsletter und Homepage werden ausgebaut und um die Einbindung der Leistungsbilanz sowie Testimonials einiger TRANSENS-Mitglieder erweitert. Es gibt eine Fortführung der Jours fixes mit dem Beirat.

<u>IELF (TAP SAFE)</u>: GRS liefert Feedback zu Meilenstein 2. In Modul 3 wird in drei Workshops mit der AGBe das TD-Experiment fortgeführt (Meilenstein 5). Ein TD-Format im Rahmen der Graduiertenakademie der TUC wird geplant und vorbereitet. Im TAP-Modul 4 wird der Meilenstein 13 erreicht. Es werden Prototypen zur Visualisierung von unsicheren Parametern und Ergebnissen entwickelt.

<u>LfDG:</u> Die multiphysikalischen Simulationen sollen dem Diskurs mit der AGBe dienen, insb. im Hinblick auf die TH2M-Simulation von Zustandsgrößen sowie deren Bedeutung u. a. für ein Nahfeld-Monitoring eines 2-Sohlen-Endlagers. Weitere Simulationen sollen an den Lokalmodellen im Steinsalz und am reduzierten Lokalmodell im Tonstein begonnen werden. Über die Website soll an der Optimierung der Visualisierung von Zustandsgrößen gearbeitet werden und eine interaktivere Darstellung in Form von Imagemaps entwickelt werden.

<u>risicare</u>: Zu der Fortführung der aktuell laufenden Aufgaben kommt die Vorbereitung eines TRANSENS-Berichts mit Beiträgen aus ingenieurwissenschaftlicher Perspektive, die Organisation und Moderation eines Workshops an der BASE-Sicherheitskonferenz und der Beginn einer Studie zu "Transparenz und technische Information".

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Eckhardt, Anne (2021): Sicherheit angesichts von Ungewissheit – Ungewissheiten im Safety Case. Literaturstudie. Zollikerberg. TRANSENS-Bericht-01. ISSN (Online): 2747-4186

Eckhardt, Anne (2021): Stressfaktor Mensch. Menschliche Einflüsse auf das verschlossene Endlager – Versuch einer wissenschaftlichen Annäherung. Zollikerberg. TRANSENS-Bericht-03. ISSN (Online): 2747-4186

| Zuwendungsempfänger:   |                           | Förderkennzeichen: |  |
|--|---------------------------|--------------------|--|
| Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Christian-                                    | Albrecht-                 | 02 E 11849B        |  |
| Platz 4, 24118 Kiel  |                           | 02 E 11849B        |  |
| Vorhabensbezeichnung:  |                           |                    |  |
| Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in |                           |                    |  |
| Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B  |                           |                    |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle         |                           |                    |  |
| Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1                                 |                           |                    |  |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitraum:         |                    |  |
| 01.10.2019 bis 30.09.2024  | 01.01.2021 bis 30.06.2021 |                    |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:            |                    |  |
| 1.375.945,00 EUR   | Prof. Dr. Ott             |                    |  |

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Die Antragstellenden der CAU sind Projektpartner im TAP DIPRO.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Am Philosophischen Seminar und am Institut für Informatik werden in interdisziplinärer Kooperation (i) Narrative des Entsorgungsdiskurses analysiert, (ii) eine Theorie von "wicked communication" entwickelt, (iii) gesellschaftliche Steuerungsmedien bewertet, (iv) Nachvollziehbarkeit und Transparenz des Entsorgungsprozesses wissenschaftstheoretisch untersucht und über Visualisierungen für den transdisziplinären Forschungsmodus aufbereitet, unterstützend wird hierzu (v) eine Multimediawerkstatt aufgebaut.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm in DIPRO zeichnet sich durch eine disziplinäre Aufbereitung von Sachverhalten, die interdisziplinäre Verständigung darüber und im Kern der Forschungsarbeit durch Workshops aus, bei denen verschiedene transdisziplinäre Formate entsprechend der Themensetzung zur Anwendung kommen werden. Im ersten Projektjahr soll zudem eine eigens für DIPRO gebildete Begleitgruppe aus wenigen Laien eingesetzt werden, die die Gestaltung und die Inhalte der Workshops über die Projektlaufzeit hin reflektiert.

Die zentralen Forschungsfragen, die DIPRO an die Begleitgruppe und die Workshops stellt, sind:

- 1. Welche normativen Voraussetzungen, praktischen Anforderungen und gesellschaftlichen Erwartungen gilt es, für ein gerechtes und resilientes Verfahren und den jeweiligen Entsorgungspfad zu berücksichtigen?
- 2. Welche gesellschaftlichen Erwartungen und Ansprüche an eine zielführende Endlager-Governance und Öffentlichkeitsbeteiligung lassen sich identifizieren und wie können diese in politische Maßnahmen einfließen?
- 3. Wie ist das Standortauswahlverfahren unter Bedingungen von "wicked problems" und "wicked communication" im Sinne von "good governance" auszugestalten?

Neben anwendungsorientierter Grundlagenforschung (desk-research, Experimente) bestehen die wesentlichen Arbeitspunkte des Kieler Teilprojektes in der Entwicklung, Durchführung und Evaluation transdisziplinärer Formate (Workshops, Multimediawerkstatt, Informationsdesigns). Inhaltliche Schwerpunkte liegen auf Verfahrensgerechtigkeit, Kommunikation und Standortverantwortung.

#### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Weiterentwicklung Kommunikationsstrukturen innerhalb DIPRO
- Fortsetzung Aufarbeitung des Forschungstandes inter- und transdisziplinärer Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle

- Schulungen in und Durchführung von TD-Beobachtung in anderen TAPs
- Vorträge auf dem Online-Projekttreffen:
  - o Ergebnispräsentation studentischer Arbeit zu Einfluss von Design bei Kartendarstellungen im Kontext der Endlagersuche (P. Bräuer, I. Peters)
  - o Kurzimpuls zur Erarbeitung des 1. DIPRO-Arbeitsberichts (M. Berg, P. Bräuer)
  - o "Teilgebiete-Prozess ethisch eingeordnet" (K. Ott)
  - o "TD und Intervention in die Gesellschaft" (R. Sierra, K. Ott)
- Weiterentwicklung des TD-Konzeptes
- Kontinuierliche Arbeit mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG): Einrichtung einer monatlichen Teeküche; Inhaltliche Workshops zu a) individuellen Problemzugängen (Steckbriefspiel Hinrunde 13.03.2021 online); b) Von der Forschungsfrage zum gemeinsamen Problemverständnis (08.05.2021 online) c) Steckbriefe Rückrunde und Austausch mit Klaus-Jürgen Röhlig (26.06.2021 online); Teilnahme (jeweils inklusive eines Vortrags) der DBG an den TRANSENS-Treffen im März und Juli
- Finalisierung, Review und Publikation der Textbeiträge für den 1. Arbeitsbericht (siehe Publikationen)
- Vorbereitungen Workshop B zum Wicked Problem im Naturkundemuseum Berlin, November 2021, Planungen Workshop C an der CAU Kiel, November 2021
- Erste TD-Studie der Multimedia-Werkstatt (29.05.21 online) zu WebGIS-Projekt (interaktive Karte), Codesign von Forschungsfragen und Anwendungskonzepten in Kooperation mit FFU und DBG
- Begriffsarbeit wicked communication: Veröffentlichungen geplant
- Konzeption eines Workshops auf der International Transdisciplinarity Conference 2021 (online) in Zusammenarbeit mit TAP-TRUST und TAP-HAFF
- Erstellung 2. Arbeitsbericht: Koproduktion mit DBG
- Weiterentwicklung der Projekthomepage (P. Bräuer, M. Riemann)
- Vorträge auf dem Projekttreffen in Braunschweig: (M. Berg, R. Sierra, P. Bräuer)
  - o "Forschungsaktivitäten im TAP DIPRO Überblick und Einführung" (M. Berg, U. Smeddinck)
  - o "Beteiligung, Verfahrensgerechtigkeit und Standortauswahl" (R. Sierra)
  - "Verbesserung des Dialogs bei der Endlagersuche" Ergebnispräsentation + Diskussion WebGIS-Projekt
     (P. Bräuer, L. Schwarz)
- Vorstellung von Projektergebnissen auf wissenschaftlichen Fachkonferenzen, z. B. Internationales Symposium für Informationswissenschaft

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterentwicklung Problemverständnis und inhaltliche Forschung mit der DBG (9/2021)
- Einzelpublikationen in Vorbereitung (Narrative, Framing, Kompensation, wicked communication, Intervention in TD-Forschung)
- Workshop C zu Verfahrensgerechtigkeit und wicked communication (11/21)
- Workshop B zum Wicked Problem im Naturkundemuseum Berlin (11/21)
- Konferenzbeiträge
- Weiterentwicklung WebGIS (bis Ende 2021)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Lemke, Steffen, Bräuer, Paula, Peters, Isabella (2021): Does the General Public Share Research on Twitter? A Case Study on the Online Conversation About the Search for a Nuclear Repository in Germany. Internationales Symposium für Informationswissenschaft. Universität Regensburg. https://doi.org/10.5283/EPUB.44940

Schwarz, L., Bräuer, P. (2021): Improving Participation for the German Search for a Nuclear Waste Repository Site: An Interactive Map as a Transdisciplinary Approach [Other]. pico. https://doi.org/10.5194/egusphere-egu21-10969 Dörte Themann, Thomas Hassel, Fabian Präger, Moritz Riemann, Ulrich Smeddinck: Zur Besetzung der DIPRO-Begleitgruppe im TAP DIPRO

Margarita Berg, Ulrich Smeddinck, Rosa Sierra, Moritz Riemann: Dialog(e) in der Endlagerforschung

Rosa Sierra, Moritz Riemann: Gerechtigkeit in der Endlagerung aus Sicht der Ethik und der politischen Philosophie Konrad Ott: Zum Begriff der Abwägung

Konrad Ott, Rosa Sierra: DIPRO: Gedanken zur Kompensation

Maximilian Roßmann, Margarita Berg: Framing und Narrative der Endlagersuche

Konrad Ott: "Framing"

Isabella Peters: Ontologien – oder: Eine formalisierte Repräsentation des Weltwissens

| Zuwendungsempfänger:   |  | Förderkennzeichen: |  |
|--|--|--------------------|--|
| Freie Universität Berlin, Kaiserswerther Str. 16-18                            | , 14195 Berlin   | 02 E 11849C        |  |
| Vorhabensbezeichnung:  |  |                    |  |
| Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur                                | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in |                    |  |
| Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C  |  |                    |  |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |  |                    |  |
| Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.3                         |  |                    |  |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitrau  | ım:                |  |
| 01.10.2019 bis 30.09.2024  | 01.01.2021 bis   | 30.06.2021         |  |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:   |                    |  |
| 991.894,00 EUR   | Dr. Brunnengrä   | ber                |  |

In TRANSENS wird transdisziplinär geforscht: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP), eingebunden. Die Analyse der transdisziplinären Forschungsaktivitäten soll Hinweise liefern, wie die Kommunikation zwischen Wissenschaft und den Beteiligten des Standortauswahlverfahrens und der Bevölkerung verbessert werden kann. Spezielle Aktivitäten zielen auf Aus- und Weiterbildung sowie auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die FU Berlin ist zentral am TAP DIPRO beteiligt: Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance.

Untersucht werden in interdisziplinärer Kooperation und mittels transdisziplinärer Formate:

- Narrative und Frames der Entsorgungsdiskurse/wicked communication,
- Charakteristika von wicked problems aus dialogischer Perspektive,
- Wissensbestände und vertrauensbildende Wissensaufbereitung und -vermittlung sowie
- Formen und Medien der Regulierung.

Die FU Berlin ist zudem in die Transdisziplinäre Begleitung eingebunden (TD-Begleitung). Hier erfolgt die formative und reflektierende Begleitung der TAP-Forschenden und der am Forschungsprozess beteiligten Öffentlichkeit wie der außerakademischen Akteure.

#### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Fertigstellung von zwei Exposees der Doktorand\*innen
- Zwei Veröffentlichungen in Sammelbänden und drei in Journals

# DIPRO:

- Beginn der Zusammenarbeit mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG); Durchführung mehrerer Treffen und Konzeption/Organisation eines gemeinsamen Workshops
- Mitarbeit an der Fertigstellung des ersten DIPRO-Arbeitsberichts
- Begleitforschung zur Fachkonferenz Teilgebiete (FKTG)
- Wiederaufnahme der Vorbereitung des Workshop B im Museum für Naturkunde (MfN)

- Ergänzend: Beginn mit der Konzeption von zwei Fachworkshops: I. Zur Öffentlichkeitsbeteiligung, II. zum Science-Policy Interface
- Arbeit an peer-reviewed Veröffentlichungen: 1. Transdisziplinarität in der Risikoforschung, 2. Gender-Dimensionen der bundesdeutschen Endlager-Governance, 3. Kompensation, 4. Analyse der FKTG, 5. Konzeptpapier "Gute Öffentlichkeitsbeteiligung", 6. Konzeptpapier zum "weichen Endlagerstaat"
- TD-Studie Dialog durch ein WebGIS mit DIPRO-Begleitgruppe (zus. mit CAU Kiel)

# BegleitTeam.TD

- TelKos zur Vorbereitung und Unterstützung bei online Treffen mit TD-Beauftragten
- Sichtung aktueller Literatur zur Transdisziplinaritätsforschung und erster Entwurf für eine Veröffentlichung zu "TD und Endlager-Governance"

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- Analyse der dritten FKTG/Veröffentlichung im Forschungsjournal SB
- Erarbeitung eines Papiers für ECPR, dass peer-reviewed veröffentlicht werden soll (ein eingereichtes Abstract zum "weichen Endlagerstaat" wurde angenommen)
- Fertigstellung des Manuskripts zu "Transdisziplinarität"
- Fertigstellung des Konzeptpapiers "Gute Öffentlichkeitsbeteiligung"
- Organisation und Durchführung des Workshop B sowie der Workshops I/II
- Weiterarbeit an vier geplanten peer-reviewed Veröffentlichungen (Diskurs, Analyse FKTG, Konzeptpapier "weicher Endlagerstaat" und Kompensation)

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Vortrag: Schwarz, Lucas; Bräuer, Paula (2021): Improving participation for the German search for a nuclear waste repository site: an interactive map as a transdisciplinary approach. In: EGU General Assembly 2021

Brunnengräber, Achim (2021): Die Stecknadel auf der Atom-Landkarte. Wie wir in Deutschland zu einem Endlager für hochradioaktive Abfälle kamen, in: Aus Politik und Zeitgeschichte, Bundeszentrale für politische Bildung, B 21-23/2021, 24-31

Themann, Dörte et al. (2021): Power over, power with und power to bei der Standortsuche für ein Endlager. Über die Ausübung von Macht beim ersten Beratungstermin der Fachkonferenz Teilgebiete (FKTG), in: Forschungsjournal NSB plus (online)

Themann, Dörte et al. (2021): Alles falsch gemacht? Machtasymmetrien in der Öffentlichkeitsarbeit bei der Standortsuche für ein Endlager, in: Forschungsjournal NSB plus (online)

Brohmann, Bettina et al. (Hrsg.) (2021): Robuste Langzeit-Governance bei der Endlagersuche., Bielefeld: transcript. Darin - Mez/Häfner: Nukleare Technopolitik in der BRD – zwischen technischer Utopie und sozialer Dystopie, 45-60; Darin - Sieveking/Brunnengräber: Der socio-technical divide im Endlagerdiskurs. Zur politischen Dimension der Nutzung konkurrierender Begriffe und Bedeutungen – Analyse und kritische Reflexion, 245-264

| Zuwendungsempfänger:   |                | Förderkennzeichen:        |
|--|----------------|---------------------------|
| Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher I                                 |                | 02 E 11849D               |
| Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz                                 | z 1, 76344 Eg- | 02 E 11047D               |
| genstein-Leopoldshafen   |                |                           |
| Vorhabensbezeichnung:  |                |                           |
| Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur                                | Entsorgung ho  | chradioaktiver Abfälle in |
| Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D  |                |                           |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                |                           |
| Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Fel-                             | d:2.1          |                           |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra | um:                       |
| 01.10.2019 bis 30.09.2024  | 01.01.2021 bis | 30.06.2021                |
|  |                |                           |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter: |                           |
| 550.967,50 EUR   | Dr. Metz       |                           |

In TRANSENS soll transdisziplinär zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland geforscht werden. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Gemäß dem Projektantrag liegen der Schwerpunkt unserer Aufgaben im Modul 1 "Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung" des TAP "HAndlungsFähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren" (HAFF). Im Verlauf des TRANSENS-Vorhabens ergaben sich auch einige Aufgaben im HAFF-Modul 3 "Konzeptionelle Grundlagen und Basisinformationen". Die Hauptaufgaben des KIT-INE gliedern sich in das

AP1: "Sicherung von Handlungsfähigkeit im Standortauswahlverfahren und der Betriebsphase" und das

AP2: "Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen".

In diesem Modul werden von uns Fragestellungen überprüft, die im Kontext des Standortauswahlverfahrens für Wärme entwickelnde Abfälle hinsichtlich Reflexivität und Reversibilität des Verfahrens von besonderer Bedeutung sind. Hierzu werden Arbeiten zur Zwischenlagerung und Entwicklung von Tiefenlagersystemen unter Berücksichtigung der technischen Barrieren und deren Implikationen durchgeführt, wobei insbesondere die Verknüpfung von Infrastruktur-, Strahlenschutz- und Betriebssicherheitsaspekten verschiedener Komponenten des Entsorgungspfads analysiert werden. Im weiteren Verlauf des Verbundvorhabens soll gemeinsam mit Partnern des TAP HAFF Haltepunkte definiert werden, an denen der jeweilige Sicherheitsstatus eines Entsorgungspfads überprüft und ein Dialog mit der Bevölkerung angestrebt wird.

Zusammenarbeit im Forschungsverbund TRANSENS: Das Arbeitspaket 2 "Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen" wird durch einen Mitarbeiter des KIT-INE geleitet.

#### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Schwerpunkt unserer Arbeiten im ersten Halbjahr 2021 lag auf einer Ausarbeitung zu Begrifflichkeiten verschiedener Entsorgungspfade für hochradioaktive Abfälle sowie die Beschreibung exemplarischer Pfade und deren (Neben-)Wirkungen. Hierbei wurde neben der Identifizierung potentieller Zukunftspfade zur verlängerten Zwischenlagerung und Endlagerung mit der Folgenanalyse von Maßnahmen innerhalb dieser Pfade gearbeitet. Unsere Analyse berücksichtigte zunächst vorwiegend Infrastruktur-, Strahlenschutz- und Betriebssicherheitsaspekte verschiedener Komponenten ("Objekte") der Entsorgungspfade. Die vorläufigen Ergebnisse wurden in einem dreizehnseitigen Text "Verknüpfungen und Interdependenzen langfristiger Entsorgungspfade" dargestellt, der dem gleichnamigen Kristallisationskern "K1" des TAP HAFF zugeordnet ist. Dieser Text bietet anderen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern von HAFF und anderer TAP des Vorhabens TRAN-SENS die Möglichkeit, in systematischer Weise an der Pfadindentifikation und Folgenanalyse weiterzuarbeiten.

Bereits bei der Analyse der ersten Entsorgungspfade zeigten sich offensichtliche Verknüpfungen von Zwischen- und Endlagerung. Die Verknüpfungen zwischen den Entsorgungspfaden können durch "Knotenpunkte" in den Entsorgungspfaden markiert werden. Darüber hinaus wurde die Bedeutung von "Haltepunkten" innerhalb von Entsorgungspfaden (selbst von linearen Entsorgungspfaden) herausgearbeitet. Gemeinsam mit anderen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern von HAFF beschäftigen wir uns zu dieser Thematik im Kristallisationskern "Haltepunkte – Erwartungen und Optionen der Ausgestaltung" (K2).

Ergebnisse der Arbeiten zu beiden Kristallisationskernen sind gekürzt im ersten Arbeitsbericht zum TAP HAFF zusammengefasst, der zu Beginn des zweiten Halbjahrs 2021 fertiggestellt werden soll. Das im Projektantrag beschriebene HAFF-Modul 3 wurde aus fachlichen Gründen zum überwiegenden Teil in die transdisziplinären Arbeiten des HAFF-Moduls 1 und des HAFF-Moduls 2 ("Raumwirkungen und Governance") integriert, wodurch sich u. a. unsere Zuarbeiten zum ursprünglichen Modul 3 gut einbinden lassen.

F. Becker (der TD-Beauftragte des KIT-INE) und V. Metz beteiligten sich an einer Reihe von virtuellen Treffen (online Besprechungen) zum TRANSENS-Projekt. Dazu gehören das TRANSENS-Arbeitstreffen vom 15. bis 17. März, die "Bearbeiter\*innen" Treffen am 19. Januar und 3. Mai, die TD-Beauftragten Treffen am 22. Januar und 20. April sowie die online Veranstaltungen zum "Ten Steps" Konzept zur Umsetzung transdisiziplinärer Aktivitäten am 1. März und 5. Mai, die Besprechungen der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter von HAFF am 14. Januar, 24. Februar, 16. April und 9. Juni sowie die HAFF-interne online Veranstaltung "Zukunftspfade Entsorgung" am 17. Mai.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Auf Grundlage des Berichts zum Kristallisationskern "Verknüpfungen und Interdependenzen langfristiger Entsorgungspfade" (K1) soll mit weiteren Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des TAP HAFF die Pfadindentifikation und Folgenanalyse weiterentwickelt und mit den Arbeiten zur vergleichenden Pfadheuristik abgestimmt werden. Darauf aufbauend soll eine grafische Darstellung zur Illustration potentieller, verzweigter und miteinander verknüpfter Entsorgungspfade entwickelt werden.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Aus den bisher erstellten zwei internen Thesenpapieren zu Themen des Moduls "Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung" und einer Stichpunktsammlung und deren Verschriftlichung zur Entwicklung einer grafischen Darstellung der Entsorgungspfade in TRANSENS wurde nun ein ca. dreizehnseitiger Text zu "Verknüpfungen und Interdependenzen langfristiger Entsorgungspfade" erstellt, der als Arbeitsgrundlage für das weitere Vorgehen dient.

| Zuwendungsempfänger:   |                | Förderkennzeichen:        |
|--|----------------|---------------------------|
| Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher                                   |                | 02 E 11849E               |
| Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz                                 | z 1, 76344 Eg- | 02 E 1104)E               |
| genstein-Leopoldshafen   |                |                           |
| Vorhabensbezeichnung:  |                |                           |
| Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur                                | Entsorgung ho  | chradioaktiver Abfälle in |
| Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E  |                |                           |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                |                           |
| Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1                         |                |                           |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra | um:                       |
| 01.10.2019 bis 30.09.2024  | 01.01.2021 bis | 30.06.2021                |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter: |                           |
| 2.720.831,00 EUR   | Dr. Hocke-Berg | gler                      |

In TRANSENS soll transdisziplinär zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland geforscht werden. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die ITAS-Schwerpunkte liegen im TAP HAFF und im TAP DIPRO. Wir leisten Grundlagenforschung zu Fragen der Reversibilität und des gesellschaftlichen Dialogs, die im deutschen Standortauswahlverfahren eine besondere Rolle spielen.

TAP HAFF: "HAndlungsFähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren" mit den Themen Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung, Raumwirkungen vor dem Hintergrund von Endlager-Governance sowie technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen.

TAP DIPRO: "Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance", mit dem Thema Gerechtigkeit als Ausgangspunkt. Gerechtigkeitsfragen haben insbesondere bei Projekten wie der Standortsuche und der Realisierung eines Endlagers einen hohen gesellschaftlichen Stellenwert.

# Zusammenarbeit im Forschungsverbund:

Mit dem TAP SAFE wird empirisch kooperiert. Ebenso kooperiert ITAS im Rahmen der Transdisziplinaritätsforschung mit den TD-Experten innerhalb des Forschungsverbundes (I-TD und BegleitTeam.TD). ITAS ist im Sprecherteam des Forschungsverbundes ebenso vertreten wie in der I-TD (2 Mitarbeiter). TAP HAFF und TAP DIPRO werden jeweils durch einen ITAS-Mitarbeiter geleitet.

#### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TAP HAFF: Aufbauend auf den Eingrenzungen des TD-Verständnisses entwickelte ITAS zusammen mit den HAFF-Partnern grundlegende Vorstellungen über ein lernendes Verfahren, welches Selbstreflexivität und Wissenschaftlichkeit erfordert, um den Bedingungen von Ungewissheit und Langzeitplanung begegnen zu können. In diesem Kontext wurde aktuell die Funktion potenzieller Haltepunkte und die des konstruktiven Umgangs mit Wissenskonflikten weiterentwickelt; parallel wurde der Zusammenhang von Pfadheuristik und Policy-Packages interdisziplinär nachgeschärft. Pfadheuristiken setzen sich mit nicht auszuschließenden Entsorgungspfaden auseinander, die als Alternativen zum heute eingeschlagenen favorisierten Entsorgungspfad nach StandAG nicht auszuschließen sind. Die sozialwissenschaftliche Methode der "Zukunftswerkstatt" wurde am ITAS einem Pretest für das ITAS-TD-AP unterzogen.

Beim ersten diesjährigen TRANSENS-Arbeitstreffen (März 2021) unterstützte ITAS die Vorbereitung und Durchführung. Zusammen mit dem Öko-Institut und dem INE konzentrierten sich die ITAS-Kollegen auf die Präzisierung der gemeinsamen interdisziplinären Fragestellung in HAFF-gesamt. Um die Dynamiken des "Denkens in Alternativen" zu klären, fand ein HAFF-Workshop statt, in dem die Eingrenzung plausibler Entsorgungspfade analytisch

vorbereitet und mit Policy-Packages in den Zusammenhang gestellt wurde (Vortrag Scheer, 17.5.21). Weitere Vorträge und erste Papiere/Veröffentlichungen dazu sind in Vorbereitung. Der Konflikt um nukleare Entsorgung wird konzeptionell auf Grundlage der mehrdimensionalen Konfliktfeldanalyse und in Bezug auf mögliche Konfliktbearbeitungsstrategien untersucht, eine Publikation in einem Fachjournal befindet sich in Vorbereitung.

TAP DIPRO: In diesem TAP standen transdisziplinäre Aktivitäten im Zentrum, bei denen der Aufbau und die Konsolidierung der DIPRO-Begleitgruppe (DIPRO-BG) besonderer Aufmerksamkeit erhielt. Personalisierte Steckbriefe waren dabei die methodische Innovation, über die die eigene Motivation, Erwartungen und die eigene Passfähigkeit der TD-Partner sowie die Verbindung zum TAP DIPRO formuliert und geklärt werden konnten. In Anschlusstreffen wurde daraufhin die Forschungsfrage abgestimmt und mit online-tools (Miro) innerhalb der DIPRO-BG "ausgedeutet", aufgefächert und letztlich auf diesem Wege angeeignet; mit Mitteln der Online-Kommunikation wurde das Kennenlernen forciert. Über "Steckbrief-Rollenspiele" (mit gegenseitiger Spiegelung und Verkörperung des jeweiligen Gegenübers) wurde die konstruktive Bereitschaft zur Zusammenarbeit im TAP hergestellt. Auf diesem Wege konnte das transdisziplinäre Co-Design in Ansätzen nachgeholt werden.

Parallel starteten ein kleines DIPRO-Team ein Teil-Modul in Zusammenarbeit mit der DIPRO-BG zur Gestaltung von Online-Landkarten, die Informationen zum Thema Endlagerung graphisch verdichten. Im AP Recht am ITAS standen die Themen Sicherheitsanforderungen, Dogmatik und Öffentlichkeitsbeteiligung im StandAG im Mittelpunkt einer Journal-Veröffentlichung (Smeddinck 2021).

TAP SAFE: Im 1. Halbjahr 2021 führte ITAS zusammen mit dem SAFE-Kernteam zwei SAFE-Workshops durch (Vortrag Röhlig/Ebeling/Hocke et al., März `21) und entwickelte das empirisch-transdisziplinäre Konzept weiter. Der Arbeitsbericht zu den Fokusgruppen wird aktuell erstellt. Parallel werden die Planungen für die Zusammenarbeit mit den TD-Partnern für die nächsten 12 Monate präzisiert.

TAP EDU: Fortführung des ITAS-Textseminars zu einschlägiger Forschungsliteratur mit Ausweitung auf weitere TRANSENS-Partner sowie Betreuung einer Masterarbeit an der Schnittstelle zu den Themen HAFF und DIPRO. Ebenso gab es zwei Vorträge sowie ein Rollenspiel zu Endlager-Governance und Politikberatung sowie ein Seminar zu "Wissenschaft und Demokratie" mit problemorientiertem Ansatz. Anhand des Fallbeispiels der nuklearen Entsorgung in Deutschland wurden an der TU Darmstadt und in der Vorlesung zu Umweltrecht an der KIT-Fakultät für Bauingenieur-, Geo- und Umweltwissenschaften die Endlagerfrage und das Standortauswahlgesetz vertieft behandelt. Die Zahl der internen Workshops und transdisziplinären Veranstaltungen wurde durch die Corona-Lage verringert und das TD-Vorhaben entsprechend der Randbedingungen angepasst. Das im Projektantrag beschriebene HAFF-Modul 3 ("Konzeptionelle Grundlagen und Basisinformationen") wurde aus fachlichen Gründen zum überwiegenden Teil in die transdisziplinären Arbeiten der HAFF-Module Flexibilität und Raumwirkungen (Module 1 und 2) integriert.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Systematisierung und Ausarbeitung der gemeinsamen Fragestellung über Arbeitsgruppen
- Abschluss des HAFF-Arbeitsberichts Nr. 1 im Sommer 2021 (Entwurf liegt vor).
- Erste empirische Erhebungen zu den Modulen und Arbeitspaketen sowie Fortsetzung der transdisziplinären Arbeit in der DIPRO-Begleitgruppe.
- Fertigstellung d.1. TRANSENS-DIPRO Berichts und zweier Manuskripte aus dem DIPRO.
- Fortgesetzte Präzisierung des TD-Konzepts für DIPRO und HAFF sowie Mitarbeit bei der konzeptionellen Ausgestaltung im Gesamtverbund.
- Erste Arbeiten zur 2. Aufl. StandAG-Kommentars (Smeddinck et al., ersch. ca. 2023).
- Organisation eines Autor:innen-Workshops mit der DIPRO-Begleitgruppe-BG zur Evaluierung 1. TRANSENS-DIPRO-Berichts (Smeddinck 2021b).
- Ausbau der Weiterbildungsaktivitäten zum Thema "TA und Governance im selbstlernenden Verfahren" sowie im TAP EDU.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Bechthold, E. (2021): Weshalb der Begriff der Akzeptabilität hilfreich ist. In: Smeddinck 2021b, S. 81-86 Frölich, N.; Hocke, P.; Bechthold, E. (2021/i.E.): Zivilgesellschaft, abgeschlossenes Ms. liegt vor (erscheint in der Reihe ITAS-TRANSENS-Berichte)

Hocke, P.; M. Mbah; S. Kuppler (2021): Politischer Lernprozess oder naives Hoffen auf positive Effekte zukünftiger Bürgerbeteiligung? Das neue deutsche Standortauswahlverfahren bei der Entsorgung hochradioaktiver Brennstoffe. In: R. Lindner et al., Gesellschaftliche Transformationen: Gegenstand oder Aufgabe der Technikfolgenabschätzung? Baden-Baden: edition sigma/Nomos, S. 245–256

Smeddinck, U. (2021): Von Nähe und Sicherheit: Die Artikel-Verordnung nach §§ 26, 27 Standortauswahlgesetz – Sicherheitsanforderungen, Dogmatik, Öffentlichkeitsbeteiligung. 2021. Natur und Recht, (43), 289–297

| Zuwendungsempfänger:  |                      | Förderkennzeichen:        |
|---|----------------------|---------------------------|
| Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover                        |                      | 02 E 11849F               |
| Vorhabensbezeichnung:   |                      |                           |
| Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschur<br>Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F | ng zur Entsorgung ho | chradioaktiver Abfälle in |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle      |                      |                           |
| Bereich D2: Sozio-technische Fragestellung  | en, Feld:2.1         |                           |
| Laufzeit des Vorhabens:   | Berichtszeitra       | um:                       |
| 01.10.2019 bis 30.09.2024   | 01.01.2021 bis       | 30.06.2021                |
| Gesamtkosten des Vorhabens:   | Projektleiter:       |                           |
| 3.473.288,00 EUR  | Prof. Dr. Walth      | er                        |

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. LUH IRS/IW und ETH Zürich tragen zu allen vier TAP bei: Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF. Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO. In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST. Im TAP SAFE wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

IRS:

TAP TRUST: Modul 1: Übergreifender Rahmen des TAP TRUST und Leitung der AGBe

Modul 2: Transdisziplinäre Erarbeitung eines Programms zur Umweltüberwachung

TAP SAFE: Modul 6: Die Rolle der radioökologischen Modellierung im Safety Case

EDU: Aus- und Weiterbildung

<u>IW:</u>

TAP HAFF: Modul 1: Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung

Modul 2: Raumwirkungen und Governance

Modul 3: Konzeptionelle Grundlagen und Basisinformationen

TAP DIPRO: Workshop D: Darstellung technischer Randbedingungen

Workshop F: Transdisciplinarity meets reality – Lessons learned

# 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

# IRS: TAP TRUST (Modul 1):

Im März 2021 fand ein Workshop zu Vertrauen und Monitoring mit der AGBe statt. Ferner wurden qualitative Interviews zum Wissenschaftsverständnis mit AGBe-Mitgliedern durchgeführt. Der Rekrutierungsprozess und zentrale Ergebnisse der Bevölkerungsumfrage aus 2020 werden in einem Paper veröffentlicht, das sich derzeit in einem Review-Prozess (Risk Analysis) befindet.

<u>TAP TRUST (Modul 2):</u> Für den im Dezember angeschafften Detektor wurde eine 10-cm-Bleiburg mitsamt Schwerlasttisch als Spende erhalten und zunächst gemeinsam mit dem Detektor am IRS aufgebaut. Durch die

Wiederaufnahme von Dienstreisen konnte mit dem Bürgermeister der Samtgemeinde Elm-Asse ein technisch geeigneter Raum in lokalen Liegenschaften gefunden werden. Die Messstelle wird zurzeit eingerichtet.

TAP SAFE (Modul 6): Aufgrund der Pandemie und bisher ungeeigneter Bewerber ist die Stelle noch vakant.

<u>EDU:</u> Die Website zur Nachwuchsförderung wurde erweitert und steht in Zukunft als Plattform für die Weiterbildungsinhalte zur Verfügung. Es wurde eine 27 x 2-stündige Ringvorlesung für das WS 21/22 sowie das SoSe 22 unter Einbezug von 16 Referenten innerhalb des Projektes konzipiert.

<u>IW: TAP HAFF:</u> Basierend auf den IW-Arbeitszielen und den Hauptfragestellungen erfolgte in Zusammenarbeit mit KIT-INE, TUB-iBMB und IW die Fortführung der Arbeiten hinsichtlich der Darstellung des Entsorgungspfades und seiner Verknüpfungen. Bezogen auf Ungewissheiten sind Arbeiten durchgeführt worden, mit welchen die Entscheidungsfindung für das System "Technische Barriere" und der dafür notwendigen Begründungen erforscht werden.

<u>TAP DIPRO:</u> Im Rahmen der TD-Taskforce wurde mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG) gearbeitet. Nach der Konsolidierungsphase wurden personalisierte Steckbriefe für alle Teilnehmer der DBG sowie für die DIPRO Kollegen erstellt. Im Anschlusstreffen wurde die Forschungsfrage konkretisiert und mit Mitteln der online Kommunikation das Kennenlernen forciert, um arbeitsfähig zu werden.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

IRS: TAP TRUST (Modul 1): Abschließende Auswertung der Interviews und Durchführung zweier Workshops mit der AGBe zum Thema Monitoring (TAP TRUST) und Safety Case (TAP SAFE). Die Ergebnisse aus den Modulen 1 und 2 werden u. a. auf dem Forschungssymposium des BASE vorgestellt (10.-12.11.2021, Berlin).

<u>TAP TRUST (Modul 2):</u> Bei weiter stabilem Pandemiegeschehen rechnen wir mit einem Beginn des Vor-Ort-Betriebes gegen Ende August. Hierbei planen wir in einer Einführungsphase zunächst den Kontakt mit interessierten Bürger\*innen herzustellen und für den Messbedarf geeignete Messverfahren zu etablieren.

<u>TAP SAFE (Modul 6):</u> Die vakante Stelle wird zeitnah erneut ausgeschrieben.

<u>EDU:</u> Erweiterung der bestehenden web-Infrastruktur. Planung und Abstimmung je einer Exkursion und Expertenrunde für das SoSe 2022. Ab Oktober 2021 findet die Ringvorlesung statt. Für die Sommerschule in Bad Honnef wird ein Vorlesungsplan erstellt und mit den Projektpartnern abgestimmt.

<u>IW: TAP HAFF:</u> Fortführung der TAP-übergreifenden Arbeiten zu Ungewissheiten und Unsicherheiten mit dem Fokus auf der technischen Barriere. Weitere Aufbereitung einer Wissensbasis zum Themenbereich technische Barriere zur Vorbereitung transdisziplinärer Wissensvermittlung unter dem Blickpunkt Komplexität/Vollständigkeit vs. Verständlichkeit/Vertrauen. Weiterführung der Planungen für ein TD-Modul gemeinsam mit ITAS mit Themenschwerpunkt Endlagerbehälter.

<u>TAP DIPRO:</u> Weitere Zusammenarbeit mit der DBG zur Vorbereitung und Durchführung der geplanten Workshops. Aufbau einer Datenbasis zur Informationsmöglichkeit für die DBG durch die Hinterlegung von Textmaterial zu deren Verfügung. Langfristige Vorbereitung von Workshop D "Freiwilligkeit und Kompensation" unter Betrachtung TAP übergreifender Forschungsergebnisse.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- T. Hassel; T. Leusmann, V. Metz: Miteinander verzahnt Prozessschritte, Haltepunkte und Steuermöglichkeiten auf dem Entsorgungspfad vom Zwischen- zum Tiefenlager; TRANSENS Arbeitstreffen, 15.-17. März 2021
- T. Hassel; AG I 1 Endlagertechnik: Endlagerbehälter, technische Barrieren und mögliche Bergung, Rückhaltevermögen des Endlagersystems für langlebige Zerfallsprodukte in hochradioaktiven Abfällen; Impulsvortrag 1: Die Rolle des Endlagergebindes im Standortauswahlverfahren und die Verantwortung der Ingenieure; 08.07.2021 (Nachholtermin online)
- T. Hassel: BMWi-Arbeitskreis HAW-Produkte; Vortrag: Die Verwendung der CASTOR® Behälterfamilie als Endlagerbehälter in einem Tiefenlager die kritische Sicht aus der Behälterperspektive; 03./04.03.2021 online
- T. Hassel: ENTRIA Ringvorlesung Modul Rückbau von KTA; WS20/21
- Smeddinck, Ulrich (Hg.) (2021): Transdisziplinäre Entsorgungsforschung am Start Basis-Texte zum transdisziplinären Arbeitspaket "DIPRO Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance", Karlsruhe. TRANSENS-Bericht-02
- T. Hassel: Ein Jahr DIPRO Lessons learned aus ingenieurswissenschaftlicher Perspektive zur inter- und transdisziplinären Arbeit; S. 26ff

| Zuwendungsempfänger:   |                 | Förderkennzeichen:        |
|--|-----------------|---------------------------|
| Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V                            | ., Merzhauser   | 02 E 11849G               |
| Str. 173, 79100 Freiburg im Breisgau   |                 | 02 E 11849G               |
| Vorhabensbezeichnung:  |                 |                           |
| Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur                                | Entsorgung ho   | chradioaktiver Abfälle in |
| Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G  |                 |                           |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                 |                           |
| Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1                         |                 |                           |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitrau | ım:                       |
| 01.10.2019 bis 30.09.2024  | 01.01.2021 bis  | 30.06.2021                |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:  |                           |
| 505.379,00 EUR   | Dr. Brohmann    |                           |

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Weitere Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. Die Expertise des Öko-Instituts wird insbesondere in die TAPs HAFF und SAFE einbezogen.

Das TAP HAFF fokussiert auf die Flexibilität des Verfahrens, die statt eines linearen Ablaufs, ein schrittweises Vorgehen ermöglicht, das Haltepunkte im Ablauf und die Option von Rückschritten sowie die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse vorsieht. Das TAP SAFE fokussiert u. a. auf Fragen der Kommunikation und des Umgangs mit Ungewissheiten im Rahmen des Safety Case (SC). Dabei wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des SC anzupassen oder weiterzuentwickeln.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

# TAP HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren

Das TAP gliedert sich in drei Module und beinhaltet folgende Arbeitsschritte:

- a) Literaturrecherche,
- b) Experten-Interviews zu Raumwirkungen von kerntechnischen Entsorgungsanlagen allgemein sowie zu Oberflächenanlagen des Schweizer Tiefenlagers,
- c) Leitfaden-Interviews zur Kriterienentwicklung für die Bewertung potenzieller Auswirkungen von Haltepunkten und Rückschritten,
- d) Analyse der Interviews: Katalog potenzieller Auswirkungen von Haltepunkten und Rückschritten sowie Kriterien der Bewertung; raum- und zeitbezogene Muster zur Entwicklung partizipativer Ausgestaltungsempfehlungen; Erfahrungen aus dem Schweizer Fall,
- e) Transdisziplinärer Workshop mit Stakeholdern und interessierter Öffentlichkeit zur Prüfung und Weiterentwicklung der konzeptionellen Ideen,
- f) Synthese der Ergebnisse und Entwicklung von Handlungsempfehlungen zum Umgang mit raumzeitlichen Spezifika unter Berücksichtigung von Haltepunkten und Rücksprüngen.

# TAP SAFE: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität

Das TAP gliedert sich in sieben Module, an vier Modulen ist das Öko-Institut beteiligt.

In SAFE 2 wird ein Beitrag zur methodischen Konzeption für die empirischen Untersuchungen des TAP mit transdisziplinärem Ansatz entwickelt. In SAFE 3 unterstützt das Öko-Institut mit transdis-

ziplinären Arbeiten die Erfassung von Akzeptabilitätskriterien für einen SC. Geplant sind Fachworkshops, Expertendialoge sowie Workshops mit Öffentlichkeit. SAFE 4 widmet sich der Ergebnisdarstellung und Vermittlung von Modellrechnungen unter Einbeziehung kommunikativer Anforderungen. SAFE 7 widmet sich der Auswertung und der Entwicklung von Empfehlungen der fortlaufenden Beobachtungen der Module 2, 3 und 4.

# 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im TAP HAFF wurden Arbeitstreffen als virtuelle Jour Fixe verstetigt, welche im Wechsel von einzelnen HAFF-Teams vorbereitet werden. Vom 15. bis 17.3. fand ein TRANSENS Gesamttreffen ebenfalls im virtuellen Format statt. Pandemiebedingt haben sich die Arbeitsschwerpunkte zugunsten von HAFF und insbesondere Modul 2 verlagert. Inhaltliche Arbeiten in TAP SAFE wurden entsprechend nachjustiert.

#### TAP HAFF:

Zur Dokumentation und TRANSENS-internen Diskussion des Arbeitsstands im TAP ist ein Arbeitsbericht in Vorbereitung. Darüber hinaus wurden in den Modulen folgende Arbeiten durchgeführt:

Modul 2: Fortentwicklung des Literaturreviews zu Raumwirkungen, Durchführung von Experteninterviews, Kriterienentwicklung für die Auswahl von Untersuchungsregionen

Modul 3: Bearbeitung von AP3 Fallstudie zu Oberflächenanlagen in der Schweiz.

#### TAP SAFE:

Fachliche Unterstützung der Diskussion um inter- und transdisziplinäre Formate, Hinweise auf Methoden der Kommunikation und Vermittlung sowie Vorbereitung sozialwissenschaftlicher Aspekte zur Einordnung zu erwartender "menschlicher Aktivitäten" (z. B. hinsichtlich Langzeitsicherheit und Safety Case), Teilnahme an TAP-Treffen.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

In den einzelnen Arbeitspaketen sind folgende Tätigkeiten vorgesehen:

TAP HAFF: Der Arbeitsbericht zum aktuellen Stand der Arbeiten wird in Kürze fertiggestellt. In Modul 1 werden die Arbeiten an den Kristallisationskernen "Verknüpfungen und Interdependenzen langfristiger Entsorgungspfade" sowie "Haltepunkte" fortgesetzt.

In Modul 2 werden die Interviews mit den Expert\*innen abschließend ausgewertet. Anhand des daraus entwickelten Kriterienkatalogs werden die zu untersuchenden Fallbeispiele ausgewählt. Die Arbeiten an der konzeptionellen Planung und Umsetzung des ersten Td-Formats werden fortgesetzt. In Modul 3 wird die Fallstudie zu den Oberflächenanlagen in der Schweiz erstellt.

TAP SAFE: In SAFE 2 werden die Vorschläge zu sozialwissenschaftlichen Aspekten weiterentwickelt, diskutiert und entsprechend angepasst in die weiteren Arbeiten eingebunden.

Für SAFE 3 sowie übergreifend, werden die sozialwissenschaftlichen Aspekte im Hinblick auf die Berücksichtigung zu erwartender "menschlicher Aktivitäten" in unterschiedlichen sicherheitsrelevanten Kontexten eingeordnet. Eine transdisziplinäre Rückkopplung (via Kolleg/AGBe) ist vorgesehen.

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

| Zuwendungsempfänger:   |                 | Förderkennzeichen:        |
|--|-----------------|---------------------------|
| Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni                             | 135, 10623      | 02 E 11849H               |
| Berlin   |                 | 02 E 1184911              |
| Vorhabensbezeichnung:  |                 |                           |
| Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur                                | Entsorgung ho   | chradioaktiver Abfälle in |
| Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H  |                 |                           |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                 |                           |
| Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.3                         |                 |                           |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra  | um:                       |
| 01.10.2019 bis 30.09.2024  | 01.01.2021 bis  | 30.06.2021                |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:  |                           |
| 362.577,00 EUR   | Prof. Dr. von H | irschhausen               |

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik erarbeitet im TAP DIPRO auf der Grundlage disziplinärer und interdisziplinärer Forschung eine Bewertung der volkswirtschaftlichen Vorteilshaftigkeit von Organisationsmodellen bzw. Governance-Strukturen an der Schnittstelle zwischen den Prozessen des Rückbaus, der Lagerung und der Standortsuche. Unter Berücksichtigung ingenieurwissenschaftlicher Erkenntnisse sollen mögliche Synergieeffekte und Hindernisse, die eventuell Verzögerungen oder Kostensteigerungen verursachen könnten, herausgearbeitet werden. Des Weiteren erarbeitet bzw. eruiert das Fachgebiet, basierend auf Wissen über monetäre und nicht-monetäre Anreizstrukturen, in Kooperation mit anderen Partnern verschiedene Kompensationsszenarien und gesellschaftliche Möglichkeiten distributiver Gerechtigkeit im Umgang mit Lasten- und Verantwortungsverteilung.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm des TAP Dipro gliedert sich in drei Module, wovon ein Modul der wissenschaftlichen Vorbereitung und ein Modul der Synthese dient. Im Zentrum steht das Praxismodul mit einer Reihe aus drei Workshops für Teilnehmer aus dem nichtakademischen Bereich, in denen jeweils unterschiedliche Aspekte von Gerechtigkeit, Recht und Governance behandelt werden. Bei der Workshop-Organisation wechseln sich die DIPRO-Partner ab. Alle Projektpartner (im TAP DIPRO) sind bei den Workshops vertreten.

#### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Verständliche Darstellung der Sektoren (Rückbau, Endlagerung, Atommüll, Wiederaufbereitung) in Postern für Workshops, TD-Treffen und inhaltliche DIPRO- und Bearbeiter\*innentreffen
- Konzeption und Vorbereitung der TRANSENS Ringvorlesungen "Systemgut Atomkraft -Eine soziotechnische Einführung" und "Politische Ökonomik der Atomkraft" für das Wintersemester 2021/2022
- Weitere interne Reviews von Arbeitsberichten
- Der Mitarbeiter Fabian Präger hat sich als TD-Beauftragter und Teil der DIPRO Begleitgruppen (DBG) an verschiedenen diversen Onlinetreffen mit der DBG und deren Vorbereitungen beteiligt
- TRANSENS "Arbeitstreffen" am 15.03.2021: Eigener Beitrag beim "DIPRO-Nachmittag" von Christian von Hirschhausen, Ben Wealer und Fabian Präger mit dem Titel: "Narrative und Endlagerung" inklusive Diskussion des Vortrages
- Weitere Teilnahme am TRANSENS "Arbeitstreffen" an der TU Braunschweig vom 15.- 17.03.2021; aufgrund der Pandemie im Online Format
- Der Mitarbeiter Ben Wealer nimmt regelmäßig an Telkos im Rahmen der DIPRO 4er Runde zur Planung und Vorbereitung von Entscheidungen Teil
- Teilnahme an der Teamleiterrunde am 14. und 15.07.2021 (online)
- Teilnahme von Christian von Hirschhausen beim Projekttreffen in Braunschweig vom 19.- 21.07.2021
- Vorbereitungen und Administration des Arbeitstreffens vom 6.-8. Oktober 2021 in Berlin

# 4. Geplante Weiterarbeiten

- Alternativkonzept für den Workshop B (Meilenstein 7) in Kooperation mit FU Berlin
- Organisation und Durchführung des TRANSENS Arbeitstreffens im Herbst 2021 an der TU Berlin
- Erste Veröffentlichung geplant mit Arbeitstitel "Wem gehört der Atommüll?" zu rechtlichen, ökonomischen und Gerechtigkeits-Fragestellungen
- Start des Arbeitsteilprogramms zum Themenkomplex "wicked financing"

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Narrative und Gegen-Narrative – ein Bestandteil der wicked communication" von Achim Brunnengräber und Christian von Hirschhausen als Beitrag für den Arbeitsbericht

| Zuwendungsempfänger:   |                  | Förderkennzeichen:        |
|--|------------------|---------------------------|
| Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Brau                               | unschweig,       | 02 E 11849I               |
| Universitätsplatz 2, 38106 Braunschweig  |                  | 02 E 110491               |
| Vorhabensbezeichnung:  |                  |                           |
| Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur                                | Entsorgung ho    | chradioaktiver Abfälle in |
| Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I  |                  |                           |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle |                  |                           |
| Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.3                         |                  |                           |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra   | um:                       |
| 01.10.2019 bis 30.09.2024  | 01.01.2021 bis   | 30.06.2021                |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:   |                           |
| 1.239.091,00 EUR   | Prof. Dr. Stahln | nann                      |

Im Verbundvorhaben TRANSENS wird erstmalig in Deutschland transdisziplinäre Forschung zur nuklearen Entsorgung in größerem Maßstab betrieben. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden:

- HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren
- SAFE: Safety Case: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität
- TRUST: Technik, Unsicherheiten, Komplexität und Vertrauen
- DIPRO: Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST.

Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das IGG der TU Braunschweig ist in TAP TRUST eingebunden und bearbeitet Fragestellungen zu Monitoring und zur Akzeptabilität von Ungewissheiten während der Beobachtungsphase und einer Rückholung. Das iBMB der TU Braunschweig ist in den TAPs HAFF und DIPRO eingebunden und entwickelt und visualisiert dazu idealtypische Konzepte für obertägige Anlagen von Endlagern. Dabei wird der komplette Lebenszyklus der Bauwerke betrachtet. Wesentliches Element ist dabei ein lernfähiges Lebenszyklusmanagementsystem.

# 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im März 2021 wurde vom TAP TRUST ein zweitägiger Workshop mit der AGBe zu den Themen Vertrauen und Monitoring durchgeführt. Das IGG lieferte hier Input zum Thema Monitoring.

Die TU Braunschweig (IGG und iBMB) war Gastgeber beim TRANSENS-Online-Arbeitstreffen vom 15.03.-17.03.2021.

Zum TAP übergreifenden Thema "Ungewissheiten" wurde ein Beitrag ingenieurswissenschaftlicher und geologischer Perspektive von Mintzlaff/Stahlmann aus verfasst. Das Thema wurde regelmäßig auf Treffen diskutiert und auch auf dem General Assembly der European Geosciences Union (EGU) vorgestellt.

Zum Thema Nachhaltigkeit von Entsorgungsoptionen für hochradioaktive Abfälle wurde vom IGG in Zusammenarbeit mit dem TAP TRUST und dem iBMB eine Veranstaltung innerhalb der Ringvorlesung "Nachhaltigkeit im Bauwesen" (Bachelor Bau- und Umweltingenieurwesen, TU Braunschweig) konzipiert und durchgeführt. Die Veranstaltung wurde in Form eines virtuellen transdisziplinären Workshops, angelehnt an das Format des World Cafés, durchgeführt. An den Tischen wurden die Optionen Endlagerung, Tiefenlagerung mit Monitoring und Rückholbarkeit und Langzeitzwischenlagerung diskutiert.

Zur Veranschaulichung des IGG-Demonstrators "Rückholung" wurde ein 3D-Modell erstellt, die numerischen Modellierungen wurden fortgeführt.

Im Vortrag "Internationale Konzepte für Bauliche Anlagen zur Verkapselung, Verpackung oder Konditionierung von hochradioaktiven Abfällen - Optionen für einen Endlagerstandort in Deutschland?" wurden auf dem TRANSENS-Treffen internationale Konzepte für Anlagen zur Umlagerung von hochradioaktiven Abfällen aus Transport- in Endlagerbehälter vorgestellt und verglichen. Im Vortrag "Miteinander verzahnt - Prozessschritte, Haltepunkte und Steuermöglichkeiten auf dem Entsorgungspfad vom Zwischen- zum Tiefenlager", der in Zusammenarbeit mit Volker Metz (KIT-INE) und Thomas Hassel (LU Hannover) entstanden ist, hat Thorsten Leusmann (iBMB) drei mögliche Szenarien für die über den aktuellen Genehmigungszeitraum hinausgehende Zwischenlagerung vorgestellt. Je nach Szenario ergeben sich unterschiedliche Anforderungen an die baulichen Anlagen am Endlagerstandort.

Zusammen mit dem Ökoinstitut und der Universität Kassel wurde weiter an dem virtuellen Experiment zur Raumwirkung der Oberflächenanlagen gearbeitet. Am iBMB wurden dazu erste modularisierte 3D-Modelle für obertägige bauliche Anlagen am Endlagerstandort entwickelt. Mit der Arbeitsgruppe um Melanie Mbah, Julia Neles, Oliver Sträter, Sina Bremer, Thorsten Leusmann und Dirk Lowke wurde ein Abstract für die "3rd Conference on Key Topics on Deep Geological Disposal – Challenges of a Site Selection Process: Society – Procedures – Safety – DAEF 2022" erstellt und eingereicht. Die Tagung findet vom 21. bis 23. März 2022 in Köln statt. Das Abstract trägt den Titel "Spatial effects of surface facilities for final disposal: perceptions of the same and impact on place attachment – a transdisciplinary experimental setting due to the uncertainties caused by the Corona pandemic".

Darüber hinaus hat das iBMB am Forum Zwischenlagerung, veranstaltet von der BGZ am 23.4.2021 und am TAP HAFF internen Workshop zu Endlagerpfaden am 17.5.2021, organisiert durch das KIT ITAS, teilgenommen.

# 4. Geplante Weiterarbeiten

Das TAP-übergreifende Thema Ungewissheiten wird auf dem TRANSENS-Treffen in Braunschweig (19.-21.07.2021) vorgestellt und diskutiert werden.

Beim Herbsttreffen der AGBe wird das Thema Rückholung und die Auswahl eines Wirtsgesteins für die vertiefte Weiterarbeit diskutiert werden. Dieses wird aktuell vom IGG vorbereitet. Zum TAP-übergreifenden Thema Ungewissheiten ist ein Arbeitsbericht derzeit im Review, in dem der Beitrag zu den Ungewissheiten bei geotechnischen und geologischen Barrieren, der durch das IGG verfasst wurde, ein wesentlicher Bestandteil sein wird. Die numerischen Modellierungen werden fortgeführt und Experteninterviews zum Thema Rückholung ausgewertet.

Das iBMB beteiligt sich an der Ausgestaltung der TD-Elemente und entwickelt dazu parallel idealtypische Konzepte für obertägige Anlagen von Tiefenlagern bestehend aus Eingangslager mit Konditionierungsanlage sowie dessen Infrastruktur und der baulichen Transportinfrastruktur unter Tage. Auf Basis der Literaturrecherche zur Ableitung baulicher Kriterien für obertägige Anlagen zur Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland wird eine (zunächst interne) Datenbank angelegt. Dabei werden neben internationalen Konzepten ebenfalls die Aspekte der Lebensdaueranalyse, Dauerhaftigkeit und des Monitorings berücksichtigt. Darüber hinaus sind weitere studentische Arbeiten geplant.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Mintzlaff, V., Stahlmann, J.: Uncertainty Chains in the Geological and Geotechnical Barriers of a HAW-disposal site, EGU General Assembly 2021, online, 19–30 Apr 2021, EGU21-12797, https://doi.org/10.5194/egusphere-egu21-1279. 2021

| Zuwendungsempfänger:   |                   | Förderkennzeichen:        |
|--|-------------------|---------------------------|
| Universität Kassel, Mönchebergstr. 19, 34125 Kass  | sel               | 02 E 11849J               |
| Vorhabensbezeichnung:<br>Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur   | Entsoroung ho     | chradioaktiver Ahfälle in |
| Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J  |                   |                           |
| <b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.2 |                   |                           |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitrau   | ım:                       |
| 01.10.2019 bis 30.09.2024  | 01.01.2021 bis    | 30.06.2021                |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter:    |                           |
| 327.569,00 EUR   | Prof. Dr. Sträter | r                         |

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert; spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Im TAP HAFF soll Flexibilität statt ein linearer Ablauf des Verfahrens erarbeitet werden durch ein schrittweises Vorgehen, mit Haltepunkten im Verfahrensablauf, der Option von begründeten Rückschritten und Reaktion auf neue Forschungsergebnisse.

Im TAP SAFE wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern. Weiterhin wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

# 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Fachgebiet Arbeits- und Organisationspsychologie beteiligt sich insbesondere am TAP HAFF und TAP SAFE mit folgenden Arbeitspaketen:

- HAFF AP1: Psychologische Aspekte bei der Entscheidungsfindung für Haltepunkte und Rückschritte.
- HAFF AP2: Unterstützung des schrittweisen Verfahrens hinsichtlich einer positiven Sicherheits- und Fehlerkultur.
- HAFF AP3: Anwendung der Methodik auf Szenarien.

#### sowie

- SAFE AP1: Bestandsaufnahme ganzheitlicher, systemischer Effekte der menschlichen Zuverlässigkeit auf den Umgang mit Sicherheitsanforderungen.
- SAFE AP2: Methode zur Berücksichtigung der Aspekte der menschlichen Zuverlässigkeit in den Einschätzungen und Bewertungen von Ungewissheiten.
- SAFE AP3: Anwendung der Methodik auf Modellrechnungen und Ergebnisdiskussionen.

#### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

HAFF AP1: Der Ansatz zur Bewertung von Entscheidungsqualität in Form eines Fragebogenverfahrens wurde fertiggestellt und soll im kommenden Berichtszeitraum im Rahmen von TRANSENS eingesetzt und evaluiert werden.

HAFF AP2: Weiterbearbeitung des Arbeitsberichtes für die Umsetzung einer positiven Sicherheits- und Fehlerkultur (in Zusammenarbeit mit dem Öko-Institut und KIT).

HAFF AP3: Bezüglich einer guten psychologischen Kommunikationskultur wurden Synergien in der Verbindung des transdisziplinären Ansatzes mit dem Thema Kommunikationskultur identifiziert; die Integration

der Kommunikationskultur in die zehn Schritte des TD Ansatzes wurde als Workshop auf dem BASE Symposium ,Interdisziplinäres Forschungssymposium für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung' unter dem Titel ,Transdisziplinärer Prozess und psychologisch resiliente Kommunikation in der Interaktion der Akteure' angeboten.

Das im Projektantrag beschriebene HAFF-Modul 3 ("Konzeptionelle Grundlagen und Basisinformationen") wurde aus fachlichen Gründen zum überwiegenden Teil in die transdisziplinären Arbeiten der HAFF-Module Flexibilität und Raumwirkungen (Module 1 und 2) integriert.

SAFE AP1: Die Methoden zur Bewertung der menschlichen Zuverlässigkeit hinsichtlich ganzheitlicher, systemischer Effekte auf den Umgang mit Sicherheitsanforderungen wurden weiterentwickelt und dem diversen Fachpublikum vorgestellt (siehe Punkt 5).

SAFE AP2: Die Analysen des Einflusses der menschlichen Zuverlässigkeit in den Einschätzungen und Bewertungen von Ungewissheiten auf der Basis der BMU Sicherheitsanforderungen wurden mit der TRANSENS Teamleitung validiert.

SAFE AP3: Mögliche Szenarien zur Demonstration der Bedeutung der Berücksichtigung menschlicher Einflüsse auf die Modellierungsunsicherheit in der geologischen Modellierung als Anwendungsfeld wurden untersucht (in Zusammenarbeit mit TU Clausthal).

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

HAFF AP1: Das entwickelte Fragebogenverfahren soll im Rahmen von TRANSENS mit den Projektpartnern eingesetzt und evaluiert werden, hinsichtlich seiner Möglichkeiten zur Einschätzung einer Organisation oder eines Verfahrens hinsichtlich seiner Entscheidungsqualität.

HAFF AP2: Weiteres Ausarbeiten des Arbeitsberichts zur Kommunikationskultur für spezifische Anwendungsszenarien im Rahmen der Endlagersuche (beispielsweise: Bürgerbeteiligung, Präsentation von Forschungsergebnissen, Umgang mit Unsicherheiten und Ungewissheiten).

HAFF AP3: Planung des BASE Workshop 'Transdisziplinärer Prozess und psychologisch resiliente Kommunikation in der Interaktion der Akteure' zur Integration von Kommunikation mit den zehn Schritten des TD Ansatzes.

SAFE AP1: Ausarbeiten von Empfehlungen für die Berücksichtigung der menschlichen Zuverlässigkeit beim Umgang mit den BMU Sicherheitsanforderungen.

SAFE AP2: Demonstration der Aspekte menschlicher Zuverlässigkeit anhand ausgewählter Anforderungen aus der Synopse zu den BMU Sicherheitsanforderungen.

SAFE AP3: Weiterentwicklung der Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit weiteren Endlager-Fragestellungen (nicht allein der geologischen Modellierung).

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

Vortrag: VDI forum mannheim 2020/2021: Risikofaktor Mensch? - Zuverlässiges Handeln gestalten. Im technoseum Mannheim. VDI Mannheim

Vortrag: Was braucht die Endlagersuche als lernendes und selbsthinterfragendes Verfahren? – Prozesse, Strukturen, Erfahrungen; Diskurs auf der Fachkonferenz Teilgebiete mit Oliver Straeter (AuO) und Juliane Dickel (BUND) - BASE - Endlagersuche - Veranstaltungen - (endlagersuche-infoplattform.de) Erster Beratungstermin Fachkonferenz Teilgebiete

Vortrag: Guest of Honor speech at the Webinar of the Indian Society for Reliability and Safety (SRESA) with the Indian Institute of Risk and Reliability (IIRR) and the Safety Critical Systems Lab. (IIT. MADRAS) "Human Reliability Assessment in automated systems and implications for an integrated system design" http://sresa.org.in/ICRESH/WEBINAR/ WEBINAR29MAY.pdf

Veröffentlichung: Sträter, O. (2021): Berücksichtigung menschlicher Zuverlässigkeit in der Gestaltung autonomer Systeme. TTZ. VDI. Düsseldorf

Auszeichnung: Ehrenplakette des VDI für die Leistung zum Thema menschliche Zuverlässigkeit. Tagung Technische Zuverlässigkeit 2021. VDI. Düsseldorf

Abschlussarbeit: Muxlhanga, H. (2021): Einfluss menschlicher Zuverlässigkeit auf die Annahmen und Ungewissheiten bei der Anwendung der TH2M-Modellierung eines Endlagers. Masterarbeit. Universität Kassel, Fachgebiet Arbeits- und Organisationspsychologie. Kassel

| Zuwendungsempfänger:   |                | Förderkennzeichen:        |
|--|----------------|---------------------------|
| Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johner  | ı-Straße,      | 02 W 6279                 |
| 52428 Jülich   |                | 02 11 0217                |
| Vorhabensbezeichnung:  |                |                           |
| Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Meth                                       | oden und Techr | niken für die internatio- |
| nale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFE- |                |                           |
| GUARDS-3)  |                |                           |
| Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle       |                |                           |
| Bereich D3: Sozio-technische Fragestellungen, Feld: 3.1                              |                |                           |
| Laufzeit des Vorhabens:  | Berichtszeitra | um:                       |
| 01.07.2019 bis 30.06.2022  | 01.01.2021 bis | 30.06.2021                |
| Gesamtkosten des Vorhabens:  | Projektleiter: |                           |
| 889.554,00 EUR   | Dr. Niemeyer   |                           |

Die Bundesregierung soll in ihren Bemühungen unterstützt werden, in Zusammenarbeit mit der IAEO und Euratom das Verifikationssystem zur Nichtweiterverbreitung von Kernwaffen weiterzuentwickeln. Neben der ständigen Verbesserung der Effektivität des Überwachungssystems spielen Gesichtspunkte des Kontrollaufwandes (Effizienz) eine zentrale Rolle. Dieser Aspekt hat besondere Bedeutung bei der erweiterten Aufgabenstellung der IAEO durch das Zusatzprotokoll im Hinblick auf die Entdeckung undeklarierter Nuklearmaterialien und Nuklearaktivitäten.

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen der vorangegangenen Vorhaben 02W6184, 02W6218, 02W6232, 02W6243, 02W6259 und 02W6263 auf. Die Arbeiten haben Bezug zum BMWi-Förderkonzept "Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle - (2015-2018)", zu den strategischen Zielen des 7. Energieforschungsprogramm der Bundesregierung (2018) im Rahmen der Entsorgungs- und Endlagerforschung, zum Nationalen Entsorgungsprogramm (2015) sowie zum BMWi-IAEA Joint Progamme. Die Arbeiten werden in enger Abstimmung zwischen Regierung, den Kontrollbehörden IAEO und Euratom, Industrie sowie Forschung und Entwicklung geplant und durchgeführt.

#### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP6.1: Konzepte zur Kernmaterialüberwachung

AP6.1.1: Safeguards-Konzepte für verlängerte Zwischenlagerzeiten

AP6.1.2: Safeguards-Konzepte für unterschiedliche Endlagerkonzepte

AP6.1.3 Safeguards-Konzepte für kerntechnische Anlagen im Rückbau

AP6.2: Methoden und Techniken zur Kernmaterialüberwachung

AP6.2.1: Einschluss und Überwachung

AP6.2.2: Erneute Behälterüberprüfung (Re-Verifikation)

AP6.2.3: Methoden zur Entdeckung von unabhängigen Bergbauaktivitäten und Hohlräumen

AP6.2.4: Geoinformationstechnologien

AP6.3: Kooperation, Kommunikation, Kapazitätsaufbau zur internationalen Kernmaterialüberw.

AP6.3.1: Kooperation mit der Deutschen Gesellschaft für Auswärtige Politik (DGAP)

AP6.3.2: Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals

AP6.3.3: Nationale Gremien

AP6.3.4: Internationale Gremien

#### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP6.1.1: Erarbeitung der konzeptionellen und technischen Anforderungen an die Safeguardsüberwachung der Zwischenlager in Deutschland bis mindestens 2050
- AP6.1.2: Vorbereitung des Promotionsprojekts zur Safeguardsüberwachung eines HAW Endlagers

- AP6.1.3: Beratung der IAEO zur Entwicklung einer allgemeinen Safeguards-Richtlinie für Anlagen im Rückbau
- AP6.2.1: Vorbereitung von Feldtests zur Eignung von 2D- und 3D-Laserscanning im Rahmen von Einschluss und Überwachung der Brennelementbehälter in den Zwischenlagern
- AP6.2.2: Vorbereitung eines Feldtests zur Eignung der Myonen-Tomographie zur Re-Verifikation von Brennelementbehältern in den Zwischenlagern
- AP6.2.3: Beginn eines Promotionsprojekts zur multitemporalen Satellitenbildanalyse im Rahmen der Safeguardsüberwachung von kerntechnischen Anlagen; Vorbereitung eines Fallbeispiels zum Monitoring von HAW Endlagerstandorten
- AP6.3.1: Arbeitsgruppe für Nukleartechnologie und Nonproliferation (AG2N): 2. Sitzung am 11. März 2021 (Nukleare Entsorgung) sowie 3. Sitzung am 23. Juni 2021 (Neue Reaktortechnologien und internationale nukleare Zusammenarbeit) Vorbereitung, Durchführung, Nachbereitung
- AP6.3.3: Mitarbeit in der Arbeitsgemeinschaft Kernmaterialüberwachung (AKÜ) sowie im Arbeitskreis Spaltstoffüberwachung des VGB PowerTech e.V.
- AP6.3.4: ESARDA: Mitarbeit in Gremien (Steering Committee, Executive Board) und Arbeitsgruppen, Leitung von drei Arbeitsgruppen; INMM: Leitung der 'International Safeguards Division'; INMM/ESARDA: Mitarbeit bei der Vorbereitung zur ersten gemeinsamen Jahrestagung von INMM und ESARDA (August 2021, online)

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP6.1.1: Fortführung der Erarbeitung der konzeptionellen und technischen Anforderungen an die Safeguardsüberwachung der Zwischenlager in Deutschland bis mindestens 2050
- AP6.1.2: Beginn des Promotionsprojekts zur Safeguardsüberwachung eines HAW Endlagers
- AP6.1.3: Fortführung der Beratung der IAEO zur Entwicklung einer allgemeinen Safeguards-Richtlinie für Anlagen im Rückbau, abschließende Prüfung der Richtlinie
- AP6.2.1: Fortführung der Vorbereitung von Feldtests zur Eignung von 2D- und 3D-Laserscanning im Rahmen von Einschluss und Überwachung der Brennelementbehälter in den Zwischenlagern
- AP6.2.2: Fortführung der Vorbereitung eines Feldtests zur Eignung der Myonen-Tomographie zur Re-Verifikation von Brennelementbehältern in den Zwischenlagern
- AP6.2.3: Fortsetzung des Promotionsprojekts zur multitemporalen Satellitenbildanalyse im Rahmen der Safeguardsüberwachung von kerntechnischen Anlagen; Vorbereitung eines Fallbeispiels zum Monitoring von HAW Endlagerstandorten
- AP6.3.1: Arbeitsgruppe für Nukleartechnologie und Nonproliferation (AG2N): Vorbereitung der 4. Sitzung am 28. Okt. 2021 (Internationale Safeguards und neue Technologien)
- AP6.3.3: Mitarbeit in der Arbeitsgemeinschaft Kernmaterialüberwachung (AKÜ) sowie im Arbeitskreis Spaltstoffüberwachung des VGB PowerTech e. V.
- AP6.3.4: ESARDA: Mitarbeit in Gremien (Steering Committee, Executive Board) und Arbeitsgruppen, Leitung von drei Arbeitsgruppen; INMM: Leitung der 'International Safeguards Division'; INMM/ESARDA: Mitarbeit bei der Vorbereitung zur ersten gemeinsamen Jahrestagung von INMM und ESARDA (August 2021, online), 7 Vorträge/Papiere

# 5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Glaser und I. Niemeyer (2021): Nuclear Monitoring and Verification Without Onsite Access. In: M. Göttsche und A. Glaser (Hrsg. (2021): Toward Nuclear Disarmament. Building up Transparency and Verification. Auswärtiges Amt, Berlin, S. 86-115

# Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung

In den Halbjahresberichten werden in kurzgefasster Form die Ergebnisse der aktuell bewilligten Forschungsvorhaben dargestellt. Vorhabenrelevante Publikationen werden aufgelistet, soweit es der Platz zulässt, es ist aber nicht immer möglich alle im Rahmen eines FuE-Vorhabens erfolgten Veröffentlichungen (schriftlich oder mündlich) aufzunehmen. Ferner sind Informationen zur Aus- und Weiterbildung wissenschaftlichen Nachwuchses bei den Forschungseinrichtungen nicht explizit abgefragt und ausgewiesen worden.

Es wurde daher beginnend mit dem Jahr 2015 vereinbart, zukünftig Angaben zur Gesamtzahl der Publikationen und zu Ausbildungsaspekten zu machen. Die entsprechenden Daten werden von den Forschungseinrichtungen zur Verfügung gestellt.

Die zusammenfassende Darstellung erfolgt im jeweils zweiten Halbjahresbericht eines Kalenderjahres. Damit soll zusätzlich zur Kurzdarstellung der Vorhabenergebnisse in den Fortschrittsberichten dokumentiert werden, dass und wie die FuE-Ergebnisse verbreitet werden.

#### **Publikationen**

Im Jahr 2020 erfolgten in rund 82 Veröffentlichungen in begutachteten Journalen, in Form von Schlussberichten, Doktor-, Master-, Bachelor- und Studienarbeiten oder in sonstiger schriftlicher Form die Publikation von Ergebnissen von FuE-Vorhaben durch die geförderten Forschungseinrichtungen.

Zudem wurden im Jahr 2020 rund 100 Vorträge auf Konferenzen, bei Workshops und sonstigen Veranstaltungen gehalten und Ergebnisse bzw. Zwischenergebnisse präsentiert.

# Aus- und Weiterbildung

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

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

Im Jahr 2020 waren in den hier aufgeführten FuE-Vorhaben 94 Nachwuchswissenschaftler in FuE-Vorhaben eingebunden.

# 3 Verzeichnis der Forschungsstellen

|               | Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM), Unter den Li   | nden        |
|---------------|--|-------------|
|               | 87, 12205 Berlin   |             |
| 02 E 11779    | MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im  | <b>9</b> 2  |
|               | Steinsalz, Qualitätssicherung mit Ultraschall (MgO-S3)   |             |
|               | DOE TECHNOLOGY C. LH. F. L   |             |
| 02 F 11577A   | BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine  | <b>□</b> 34 |
| 02 E 11377A   | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A                                    |             |
| 02 E 11617A   | Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskon-  | <b>46</b>   |
|               | zeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle   |             |
|               | im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt A  |             |
| 02 E 11658B   | Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismetho-   |             |
|               | dik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (AN-  |             |
|               | SICHT II), Teilprojekt B   |             |
| 02 E 11678    | Untersuchungen zur Vervollständigung von Stoffmodellen für Salz- o-  | <b>1</b> 70 |
|               | der Sorelbeton sowie spezieller low-ph und hochdichter bzw. hochfes-   |             |
|               | ter Betone zum rechnerischen Nachweis der Rissbeschränkung für   |             |
|               | Bauwerke (UVERSTOFF)   |             |
| 02 E 11749    | Weiterentwicklung der Konzepte der Transport- und Einlagerungs-  | <b>1</b> 80 |
|               | technik von Endlagerbehältern (TREND)  |             |
| 02 E 11839    | Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von  | <b>108</b>  |
|               | geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen   |             |
|               | (RANGERS)  |             |
| 02 E 11890A   | Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown  | III 152     |
|               | Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens  |             |
|               | bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsge-  |             |
|               | steine (BARIK), Teilprojekt A  |             |
| 02 E 11900    | Langzeitsicherheit von Verschlusssystemen in Schächten und Rampen  | III 156     |
|               | im Vergleich (LARYSSA)   |             |
|               | Christian Albusahta Universität zu Viel Christian Albusaht Blotz 4 2411  | 0 IZ:al     |
| 02 E 11849B   | Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Christian-Albrecht-Platz 4, 24118<br>Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochra- | 174         |
| V2 2 110 17 2 | dioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B  |             |
|               | Tan Service D  |             |
|               | Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz  |             |
| 02 E 11446A   | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgs-  | □ 18        |
|               | mechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz   |             |
|               | (WEIMOS), Teilprojekt A  |             |

|             | Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich  |             |
|-------------|---|-------------|
| 02 E 11607D | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt D                                  | <b>44</b>   |
| 02 E 11921A | Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A  | <b>162</b>  |
| 02 W 6279   | Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techni-<br>ken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im<br>Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)                                       | <b>192</b>  |
|             | Freie Universität Berlin, Kaiserwerther Str. 16-18, 14195 Berlin  |             |
| 02 E 11849C | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C  | <b>176</b>  |
|             | Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena  |             |
| 02 E 11759A | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit<br>Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche<br>Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt A                             | <b>□</b> 82 |
| 02 E 11850E | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilot-<br>projekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pi-<br>lot), Teilprojekt E  | <b>118</b>  |
| 02 E 11911B | Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B | <b>160</b>  |
|             | Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH,<br>Schwertnergasse 1, 50667 Köln   |             |
| 02 E 11466  | Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)  | <b>2</b> 8  |
| 02 E 11577B | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B   | <b>□</b> 36 |
| 02 E 11607A | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt A                                  | <b>38</b>   |
| 02 E 11617B | Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt B                              | <b>48</b>   |
| 02 E 11627  | Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)  | □ 50        |
| 02 E 11647  | Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru 8)  | □ 58        |
| 02 E 11658A | Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (AN-SICHT II), Teilprojekt A  | <b>60</b>   |

| 02 E 11668A | Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A   | <b>□</b> 64 |
|-------------|---|-------------|
| 02 E 11698  | Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)  | <b>1</b> 74 |
| 02 E 11759C | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit<br>Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche<br>Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt C   | <b>a</b> 86 |
| 02 E 11799B | Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem<br>Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B   | <b>96</b>   |
| 02 E 11809A | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische<br>Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt A  | <b>100</b>  |
| 02 E 11819  | Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in ge-<br>klüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)  | <b>104</b>  |
| 02 E 11829  | Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)  | <b>106</b>  |
| 02 E 11850B | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilot-<br>projekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pi-<br>lot), Teilprojekt B  | <b>112</b>  |
| 02 E 11870A | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A  | <b>138</b>  |
| 02 E 11880  | Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)  | <b>150</b>  |
| 02 E 11941  | Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)  | <b>166</b>  |
| •           | Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden   |             |
| 02 E 11607B | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt B  | <b>40</b>   |
| 02 E 11668B | Verbundprojekt: Smart- $K_d$ in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt B   | □ 66        |
| 02 E 11748B | Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt B | <b>4</b> 78 |
| 02 E 11769B | Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt B   | 90          |
| 02 E 11860B | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B  | <b>124</b>  |
| 02 E 11870B | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B  | <b>140</b>  |

|  | Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A   | ₩ 158       |
|--|---|-------------|
| •  | Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH – UFZ -, Permoserstr. 1<br>04318 Leipzig   | 15,         |
| 02 E 11850A  | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilot-<br>projekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pi-<br>lot), Teilprojekt A  | <b>1</b> 10 |
| •  | Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, T fenberg, 14473 Potsdam  | elegra-     |
| 02 E 11637B  | Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt B: Multiskalenansatz   | <b>□</b> 54 |
|  | IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipz  | iα          |
| 02 E 11446B  | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgs-<br>mechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz<br>(WEIMOS), Teilprojekt B  | <u>□</u> 20 |
|  | Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz  |             |
| 02 E 11860A  | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A  | <b>122</b>  |
|  | Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenbergal<br>31, 60325 Frankfurt am Main  | nlage       |
| 02 F 11900B  |   |             |
| 02 E 11609B  | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische<br>Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B  | <b>1</b> 02 |
| 02 E 11007B  | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische   | e           |
|  | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische<br>Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B  |             |
| 02 E 11637C  | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B <b>Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe</b> Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt   | e           |
| 02 E 11637C<br>02 E 11799A                               | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B <b>Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe</b> Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt C: Geomechanik von Sedimentbecken  Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A <b>Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover</b>   | e           |
| 02 E 11637C<br>02 E 11799A                               | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B  Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt C: Geomechanik von Sedimentbecken  Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A   | e 🚨 56      |
| 02 E 11637C<br>02 E 11799A<br>02 E 11446C                | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B  Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt C: Geomechanik von Sedimentbecken  Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A  Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover  Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz   | e           |
| 02 E 11637C<br>02 E 11799A<br>02 E 11446C<br>02 E 11849F | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f++: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B  Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt C: Geomechanik von Sedimentbecken  Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A  Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover  Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C  Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochra- | 94 P4 22    |

|             | Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg  |             |
|-------------|--|-------------|
| 02 E 11789  | Wegemanagement bei der Entsorgung hoch radioaktiver Abfälle in Deutschland (WERA)  | <b>170</b>  |
| 02 E 11849G | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G   | <b>184</b>  |
|             | Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen   | e           |
| 02 E 11607C | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt C   | <b>4</b> 2  |
| 02 E 11668C | Verbundprojekt: Smart- $K_d$ in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt $C$  | <b>□</b> 68 |
| 02 E 11759B | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit<br>Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche<br>Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt B  | ₩ 84        |
| 02 E 11849D | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D   | □ 178       |
| 02 E 11849E | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E   | <b>180</b>  |
| 02 E 11860C | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C   | <b>126</b>  |
| 02 E 11850F | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilot-<br>projekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pi-<br>lot), Teilprojekt F   | <b>120</b>  |
| 02 E 11921B | Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B   | <b>164</b>  |
|             | Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6,<br>09599 Freiberg  |             |
| 02 E 11557  | Gefügestabilisierter Salzgrusversatz - Phase 2 (GESAV II)  | <b>3</b> 0  |
| 02 E 11769A | Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-<br>Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt A  | ₽ 88        |
| 02 E 11799C | Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem<br>Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C  | <b>98</b>   |
| 02 E 11850C | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt C   | <b>114</b>  |
| 02 E 11890B | Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown<br>Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens<br>bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsge-<br>steine (BARIK), Teilprojekt B | <b>1</b> 54 |

|               |   | 1            |  |
|---------------|---|--------------|--|
| 00 5 440 10== | Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin  | □ 186        |  |
| 02 E 11849H   | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H  | ы 186        |  |
|               | Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig  |              |  |
| 02 E 11446D   | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgs-<br>mechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz<br>(WEIMOS), Teilprojekt D  | <b>2</b> 4   |  |
| 02 E 11849I   | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I  | <b>188</b>   |  |
| •             | Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2A, 38678 Clausthal-Zellerfeld  |              |  |
| 02 E 11446E   | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgs-<br>mechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz<br>(WEIMOS), Teilprojekt E  | ₽ 26         |  |
| 02 E 11567A   | Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim), Teilprojekt A  | <b>3</b> 2   |  |
| 02 E 11688    | Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen (Salzschnittblöcke III)   | □ 72         |  |
| 02 E 11748A   | Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt A | <b>1</b> 76  |  |
| 02 E 11849A   | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A  | □ 172        |  |
| 02 E 11850D   | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt D  | <b>1</b> 116 |  |
| •             | Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt   |              |  |
| 02 E 11637A   | Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt A: 3D-Spannungsmodell und Aufskalierung                        | □ 52         |  |
| •             | Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden   |              |  |
| 02 E 11860G   | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G  | □ 134        |  |
|               | Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München   |              |  |
| 02 E 11860E   | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E  | <b>130</b>   |  |
| 02 E 11870D   | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D  | <b>1</b> 144 |  |

|             | Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarland   |            |
|-------------|--|------------|
| 02 E 11860D | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zemental-   | <b>128</b> |
|             | terationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D  |            |
|             | 1  |            |
|             | Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald   |            |
| 02 E 11870C | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren –  | <b>142</b> |
|             | Phase II (UMB II), Teilprojekt C   |            |
|             |  |            |
|             | Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg  |            |
| 02 E 11860H | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zemental-   | <b>136</b> |
|             | terationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H  |            |
|             | ·  |            |
|             | Universität Kassel, Mönchebergstr. 19, 34125 Kassel  |            |
| 02 E 11849J | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochra-   | <b>190</b> |
|             | dioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J  |            |
|             |  |            |
|             | Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam   |            |
| 02 E 11860F | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zemental-   | <b>132</b> |
|             | terationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F  |            |
|             | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J  Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam  Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zemental- |            |