

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

PTE Nr. 41

BMBF und BMWi geförderte FuE zu
„Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen“

Berichtszeitraum: 1. Januar - 30. Juni 2011

Projektträger Karlsruhe
Wassertechnologie und Entsorgung
(PTKA-WTE)

August 2011

PTE-Berichte

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

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

- Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen
(PTE Nr. x seit 1991, fortlaufend)
- Stilllegung und Rückbau kerntechnischer Anlagen
(PTE-S Nr. x seit 2001, fortlaufend)
- Nukleare Sicherheitsforschung
(PTE-N Nr. x seit 2010, fortlaufend)

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

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

Vorwort

Das KIT betreut im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) als Projektträger FuE-Vorhaben auf dem Gebiet „Entsorgung“. Dieses umfasst die FuE-Arbeiten, die in den Förderkonzepten „Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen“ und „Schwerpunkte zukünftiger FuE-Arbeiten bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle“ sowie dessen Fortschreibungen aufgeführt sind. Unter Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen wird hierbei die Endlagerung radioaktiver und die untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle verstanden.

Im Rahmen dieses Auftrages betreut der Projektträger Karlsruhe fachlich und administrativ die vom BMBF und BMWi im Rahmen des Förderkonzepts geförderten FuE-Vorhaben. Die Betreuung der FuE-Vorhaben erfolgt für folgende Referate in den beiden Ministerien:

Endlagerung radioaktiver Abfälle	BMWi Referat III B3
Untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle	BMBF Referat 724
Sicherheitsforschung für Bergbauregionen - Prozessanalyse und Prognosewerkzeuge für Bergschadensgebiete (beendet)	BMBF Referat 724
Kernmaterialüberwachung	BMWi Referat III B4

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

Dem Bericht liegt folgendes Gliederungsprinzip zugrunde:

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

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

- E ⇒ „Endlagerung radioaktiver Abfälle“,
- C ⇒ „Untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle“ und („Sicherheitsforschung für Bergbauregionen - Prozessanalyse und Prognosewerkzeuge für Bergschadensgebiete“, beendet)
- W ⇒ „Kernmaterialüberwachung“

Die vom BMWi betreuten FuE-Vorhaben, die so genannten Hausvorhaben, sind mit der Buchstabenfolge KWA gekennzeichnet.

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

Inhaltsverzeichnis

1	Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen	1
1.1	<i>Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche *</i>	1
1.2	<i>Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse</i>	3
1.3	<i>Kernmaterialüberwachung</i>	9
2	Formalisierte Zwischenberichte	11
2.1	E-VORHABEN	11
2.2	C-VORHABEN	135
2.3	W-VORHABEN.....	141
2.4	BMW-HAUSVORHABEN	145
3	Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen.....	149

* „Endlager“ bezeichnet Endlager für radioaktive Abfälle und Untertagedeponien.

1 Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen

1.1 Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche

02 E 10075	Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 16
02 E 10086	Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-	DBE Technology GmbH, Peine	📖 18
02 E 10669	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 74
02 E 10679	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 76
02 E 10689	Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 78
02 E 10699	Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt FZK: Thermodynamische Datenbasis für Radionuklide	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 80
02 E 10709	Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt TUBAF: Ozeanische Salze und Carbonate	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 82
02 E 10719	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 84

02 E 10729	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 86
02 E 10750	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 92
02 E 10760	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL	DBE Technology GmbH, Peine	📖 94
02 E 10870	Instrumente, Bedarf und Potentiale für Wissensmanagement in der Endlagerforschung	Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Freiburg	📖 116
02 E 10880	Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 118
02 E 10921	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle -ELSA- (TV1)	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 126
02 E 10931	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle -ELSA- (TV1)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 128
KWA 9005	Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine	Projektträger Karlsruhe im Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Wasser-technologie und Entsorgung (PTKA-WTE)	📖 146

1.2 Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse

02 C 1628	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung - Phase 2, Kurztitel: WeDa-II	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 136
02 C 1638	Bentonit als Barrierematerial für den Abschluss von Untertagedeponien - Abschließende Versuche und eine Zusammenstellung von Wissenschaft und Technik (Kurztitel: Bentonit-Barrieren)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 138
02 E 9894	Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptprojekt	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 12
02 E 9944	Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 14
02 E 10156	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 20
02 E 10166	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein	Johannes Gutenberg-Universität Mainz	📖 22
02 E 10176	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Beiträge zur Modellierung des Actinidentransports in potenziellen Wirtsgesteinsformationen; Teilthema 1: Mobilitätsbestimmende Elementarprozess; Teilthema 2: Einfluss heterogener Strukturen auf den Lösungs-Kolloidtransport	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungsstelle Leipzig - Interdisziplinäre Isotopenforschung	📖 24
02 E 10186	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinidenkomplexen: Komplexbildung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien	Technische Universität München	📖 26
02 E 10196	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Untersuchungen zur Migration von Lanthaniden und Uran in natürlichen Tonformationen im Übergang von verdünnten Mineral-Suspensionen zu kompakten Tonen	Universität des Saarlandes, Saarbrücken	📖 28

02 E 10206	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere	Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 30
02 E 10216	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Spektroskopische Untersuchungen zum erweiterten Prozessverständnis in binären und ternären Huminstoff-Tongestein - Lanthanoid-Systemen: Thermodynamische und kinetische Kenngrößen	Universität Potsdam	📖 32
02 E 10306	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse	Albert-Ludwigs-Universität Freiburg	📖 34
02 E 10326	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Modellierung des Wärmetransports und Modellierung freier Oberflächen	Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main	📖 36
02 E 10336	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 38
02 E 10367	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 40
02 E 10377	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 42
02 E 10417	Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Komplexbildung und Sorption dreiwertiger Actinide Am(III), Pu(III) im System Actinid-NOM-natürliches Tongestein-Aquifer	TU Dresden	📖 44
02 E 10447	Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung	IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Deponietechnik Wilsnack & Partner, Freiberg	📖 46
02 E 10518	Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 48
02 E 10528	Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 50
02 E 10538	Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen - Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 52

02 E 10548	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 54
02 E 10558	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP1 - Kurztitel: A-DuR	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 56
02 E 10568	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP2 - Kurztitel: A-DuR	Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main	📖 58
02 E 10578	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP3 - Kurztitel: A-DuR	Friedrich-Schiller-Universität Jena	📖 60
02 E 10588	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP4 - Kurztitel: A-DuR	Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ, Leipzig	📖 62
02 E 10608	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 64
02 E 10618	Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 66
02 E 10639	Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtsformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 68
02 E 10649	Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 70
02 E 10659	Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 72
02 E 10730	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	DBE Technology GmbH, Peine	📖 88
02 E 10740	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 90
02 E 10770	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 96
02 E 10780	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	Forschungszentrum Jülich GmbH	📖 98

02 E 10790	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 100
02 E 10800	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 102
02 E 10810	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel)	Dr. Andreas Hampel, Mainz	📖 104
02 E 10820	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 106
02 E 10830	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 108
02 E 10840	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 110
02 E 10850	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)	Leibniz Universität Hannover	📖 112
02 E 10860	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)	TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig	📖 114
02 E 10890	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 120
02 E 10900	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	DBE Technology GmbH, Peine	📖 122
02 E 10910	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	📖 124
02 E 10941	Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 130

02 E 10951 Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA

**Gesellschaft für An-
lagen- und Reaktor-
sicherheit (GRS)
mbH, Köln**

 132

1.3 Kernmaterialüberwachung

02 W 6259 Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden **Forschungszentrum Jülich GmbH**  142

2 Formalisierte Zwischenberichte

2.1 E-Vorhaben

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 9894	
Vorhabensbezeichnung: Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor - Hauptprojekt			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2004 bis 31.12.2011		Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.721.522,00 EUR		Projektleiter: Rothfuchs	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im SB-Experiment soll untersucht werden, ob sich Permeabilitäten von Ton/Mineral-Gemischen so optimieren lassen, dass der sich in einem abgeschlossenen Endlagerbereich einstellende Gasdruck bei kontrollierter Abströmung der Gase über das Verschlussystem stets kleiner als die kleinste Hauptspannung bleibt, so dass im Gebirge keine unkontrollierten Risse generiert werden.

Für die Optimierung der Verschlusskörper werden das Aufsättigungsverhalten, die sich einstellenden Quelldrücke, die Gasdurchbruchdrücke sowie die Gas- und Wasserpermeabilitäten von verschiedenen Ton/Mineral-Gemischen im Labor ermittelt. Im Technikum werden die geplanten In-situ-Einbautechniken und die Messtechnik überprüft. Im Untertagelabor Mont Terri werden in einem Versuchsfeld die in situ erreichbaren Einbaudichten, Wassersättigungen in Wechselwirkung mit dem umgebenden Gebirge, die resultierenden Quelldrücke sowie die Ein- und Zweiphasenflussparameter bestimmt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Abschließende Laboruntersuchungen zur Materialauswahl, Bestimmung von Materialparametern, Ermittlung geeigneter Einbautechniken für das Dichtmaterial sowie Auslegungs- und Modellrechnungen.

AP2: Technikums- und In-situ-Untersuchungen:

Im Mt. Terri Untertagelabor werden in 4 instrumentierten Bohrlöchern an den ausgewählten Ton/Mineral-Gemischen die Einbringtechnik, die Gas- und Wasserpermeabilitäten, die Gasdurchbruchdrücke im wassergesättigten Zustand und die Zweiphasenflussparameter in Wechselwirkung mit dem umgebenden Gebirge untersucht. Zum Test der Einbring- und Verdichttechniken werden in einem Technikum in Braunschweig entsprechende Vorversuche durchgeführt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

Zum Abschluss des Technikumsversuchs Mock-up 2 wurden zur Bestimmung der Feuchteverteilung Proben horizontal durch die seitlichen Sensoröffnungen sowie vertikal von der Eingangs- und Ausgangsseite des Dichtelements entnommen und die Wassergehalte ermittelt. Da die Probenahme nur durch das Einschlagen von Probenahmerohren erfolgen konnte, war eine gewisse Kompaktion des Dichtmaterials aufgrund der Zähigkeit des Materials nicht zu verhindern. Besonders bei der Entnahme der größeren vertikal genommenen Proben war dieser Effekt stark ausgeprägt, so dass eine präzise räumliche Zuordnung nicht möglich war. Lediglich die aus den 3 horizontalen Entnahmestellen gewonnenen Proben wiesen im Trend auf eine Zunahme des Feuchtegehalts von der unteren Injektionsseite zur obigen Austrittsseite hin. Insgesamt weisen die Feuchtegehalte nach der abschließenden Gasinjektion eine relativ heterogene räumliche Verteilung auf. Der über alle entnommenen Proben gemittelte Wassergehalt betrug 18.4 %.

Die Wasserinjektionen zur Aufsättigung der SB-Dichtungen in den 4 Bohrungen BSB 1, BSB 2, BSB 13 und BSB 15 dauern an. Die Injektionsdrücke belaufen sich wie bisher auf ca. 0.37 bis 0.39 MPa. Die Maßnahme zur schnelleren Aufsättigung bei BSB 2 durch zusätzliche Wasseraufgabe über die ausgangseitige Fritte führte dazu, dass hierüber ca. 15 l Wasser zusätzlich zugeführt wurden. Durch die Wasserinjektion von der Unterseite des Dichtelements flossen hier bisher ca. 136.4 l Wasser zu, so dass vom System Dichtung/Gebirge bisher insgesamt ca. 151.4 l Wasser aufgenommen wurde. Die Drücke unterhalb der Fritte belaufen sich auf 0.19 und 0.15 MPa. Der bei der mit den Tonpellets der NAGRA bestückte Bohrung BSB 13 beobachtete Druckabbau an einem Drucksensor setzte sich bis zu einem Minimalwert von ca. 1.46 MPa fort. Seitdem steigt der Druck erneut und weist z. Z. einen Wert von ca. 2.27 MPa auf. Insgesamt wurden hier ca. 26.8 l Wasser injiziert. Die Messungen an der Bohrung BSB 15 weisen keine signifikanten Veränderungen der Druckverläufe auf.

Es ist schwierig abzusehen, ob der in situ sehr langsam ablaufende Aufsättigungsversuch bis Ende der Bewilligungsperiode erfolgreich beendet sein kann. Es wird daher anhand der Ergebnisse des Technikumsversuchs Mock-up 2 bis zur Sommerpause 2011 eine Kalibrierung des vorhandenen und bisher verwendeten Aufsättigungsmodells (elasto-plastischer Stoffmodellansatz mit hydro-mechanischer Kopplung mit Berücksichtigung von Teilsättigungs- und Quelldruckeffekten) vorgenommen und die verbleibende Aufsättigungsdauer für den In-situ-Versuch im Hinblick auf die erforderliche Entscheidungsfindung prognostiziert. Im Rahmen der Kalibrierung wird dabei eine Sensitivitätsanalyse mit Identifikation relevanter Materialparameter durchgeführt, was zu verbesserten Modellansätzen und damit zu besser belastbaren Modellierungsergebnissen führt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Aufsättigung der In-situ-Versuche und Ermittlung der Wasserpermeabilität sowie der Gaseintrittsdrücke mit verbleibender Gaspermeabilität
- Weiterführende numerische Untersuchungen mit neu erarbeiteten Modellansätzen (s. o.).
- Nachuntersuchung der erreichten Sättigung bei den In-situ-Versuchen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 9944
Vorhabensbezeichnung: Goelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2004 bis 31.12.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 438.557,00 EUR	Projektleiter: Wieczorek	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des von SKB durchgeführten Projektes "Prototype-Repository" wird die Endlagerung bestrahlter Brennelemente in vertikalen Bohrlöchern im Hartgestein durch elektrische Erhitzer simuliert. Die Versuchsstrecke und die Resthohlräume in den Einlagerungsbohrlöchern im Granit sind mit Ton-Splitt-Lockermaterial bzw. mit hoch kompaktierten Bentonit-Formteilen verfüllt. GRS überwacht in diesem Projekt seit 2001 den räumlichen und zeitlichen Verlauf der Aufsättigung der Bentonitbarrieren mit Hilfe geoelektrischer Widerstandsmessungen. Aus der Verteilung des spezifischen elektrischen Widerstandes im Bereich verschiedener Elektrodenarrays wird die Wassergehaltsverteilung an Hand bereits durchgeführter Labormessungen ermittelt. Zur Absicherung der Ergebnisse und zur Erprobung neuer Auswerteverfahren soll ein Aufsättigungsversuch mit geoelektrischer Überwachung im Labormaßstab durchgeführt werden. Die experimentellen Messergebnisse stellen eine wichtige Datenbasis zur Überprüfung der numerischen Simulation des Aufsättigungsverhaltens von Tonbarrieren in Langzeitsicherheitsanalysen dar. Der Erfolg des Vorhabens wird durch die Qualität der bisher erzielten Ergebnisse abgesichert.

Im Rahmen der Aufwältigung der Sektion II des Prototype Repository unternimmt GRS Laboruntersuchungen zur Validierung der In-situ-Ergebnisse und inspiziert die Elektroden nach zehnjährigem Einsatz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: In-situ-Ermittlung der räumlichen und zeitlichen Wasserverteilung in Gebirge, Bohrloch-Buffer und Streckenversatz

AP2: Laborversuche zur Überprüfung der Korrelation inhomogener Wasserverteilungen in tonhaltigem Versatz mit gemessener Resistivitätsverteilung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die Messungen der Resistivität im Versatz und im Gebirge wurden zunächst weiter fortgesetzt. Der Streckenversatz in den beiden Messquerschnitten ist weitgehend gesättigt (Resistivitätswerte Werte um $2 \Omega\text{m}$). Eine leichte Resistivitätserhöhung im obersten Streckenbereich in Sektion I ist vermutlich darauf zurückzuführen, dass permanent zutretendes Wasser abgepumpt wird, um den Wasserdruck in der versetzten Strecke gering zu halten, was unter der Firste zu einer leichten Entsättigung oder möglicherweise auch zu einer gewissen Setzung geführt hat.

Bei den Messungen im Buffer ist wegen des Ausfalls mehrerer Elektroden Ende 2005 eine tomografische Auswertung der Messungen nicht mehr möglich. Die Gründe für den Elektrodenausfall sind unbekannt, möglicherweise handelt es sich um Korrosionseffekte. Dies soll im Rahmen der Nachuntersuchungen geklärt werden.

Bei den Messungen im Gebirge wurden nahe den Elektroden Resistivitätswerte um $200 \Omega\text{m}$ gemessen, was charakteristisch für den wassergesättigten Beton ist, mit dem die Elektrodenbohrlöcher verfüllt sind. Außerhalb der Bohrlöcher beträgt die Resistivität 2000 bis $10000 \Omega\text{m}$, was dem gesättigten Gebirge entspricht.

Die Messungen in Sektion II wurden inzwischen wegen der Aufwältigung der Sektion beendet.

AP2: Die Laborversuche zur Simulation der Versatzaufsättigung mit begleitender Geoelektrik wurden bereits 2008 erfolgreich abgeschlossen. Wassergehaltsbestimmungen an Proben aus dem Prototype Repository werden im Zuge der Aufwältigung der Sektion II erfolgen. Am 09.06.2011 fand das erste Steering Meeting zum Äspö-Projekt "Retrieval of the Prototype Repository at Äspö Hard Rock Laboratory" statt, an dem GRS und BGR im Auftrag von BMWi teilnehmen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung der In-situ-Messungen in Sektion I

AP2: Wassergehaltsbestimmungen an Proben aus dem Versuchsfeld und Inspektion von aus dem Versuchsfeld geborgenen Elektroden

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10075
Vorhabensbezeichnung: Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 31.03.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 790.090,00 EUR	Projektleiter: Dr. Moog	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel ist die Ermittlung von thermodynamischen Daten, die die geochemische Modellierung der Eisen(II)-Chemie bei Temperaturen zwischen 25 und 90 °C ermöglichen.

Ein weiteres Ziel ist die Erweiterung des bestehenden Parametersatzes für basische Fe(II)-Lösungen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

1. Literaturstudie
2. Dampfdruckmessungen
3. Löslichkeitsmessungen
4. Untersuchung fester Lösungen
5. Untersuchung metallischer Korrosionsprodukte in quinären, hochsalinaren Lösungen
6. Auswertung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Dampfdruckmessungen:

Abschluss der isopiestic Messungen für die ternären Systeme mit Fe(II)-Cl-H₂O bei 40 °C, 60 °C und 90 °C.

Literaturstudie: -

Löslichkeitsversuche:

Abschluss des Löslichkeitsversuches im System Fe(II)-K-Cl-SO₄-H₂O (mit Arcanit bzw. Sylvin als eingesetztem Bodenkörper) bei 90 °C. Weiterführung des Löslichkeitsversuches bei einer Temperatur von 60 °C.

4. Geplante Weiterarbeiten

Dampfdruckmessungen:

Beginn der isopiestic Messungen für die sulfatischen ternären Systeme mit Fe(II)-SO₄-H₂O bei 40 °C, 60 °C und 90 °C.

Literaturstudie:

Fortführung der Literaturlauswertung bezüglich Fe(II)-OH-H₂O und für Fe(II)-Cl-H₂O im System der ozeanischen Salze.

Löslichkeitsversuche:

Fortsetzung der Löslichkeitsversuche im System Fe(II)-K-Cl-SO₄-H₂O bei 60 °C und 40 °C.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10086
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2006 bis 30.06.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.795.867,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Wesentliche Veränderungen einer potenziellen Endlagerformation entstehen durch die bergtechnische Auffahrung der untertägigen Hohlräume und durch die Einbringung einer großen Wärmemenge von den wärmeentwickelnden Abfällen. Es ist Ziel dieses Vorhabens, die Temperaturbelastung auf die geotechnische und geologische Barriere im Zusammenhang mit dem Isolationspotenzial der Wirtsformation sowie mit der ingenieurtechnischen Realisierbarkeit der untertägigen Bohrlochlagerung zu charakterisieren. Untersuchungen haben gezeigt, dass geeignete Endlagerkonzepte für Tonsteinformationen in Deutschland erreicht werden können, wenn man die Wärmeleitfähigkeit des Barriere-materials durch Zusatzstoffe erhöht. Dadurch wird die eingebrachte Wärme besser in die Tonformation abgeführt. Um diese Konzepte zu prüfen, sind entsprechende Materialuntersuchungen vorgesehen. Die eingebrachte Wärme bedingt auch permanente temperaturinduzierte Spannungsveränderung, deren Einfluss auf die Stabilität von Einlagerungsbohrlöchern und auf die Entwicklung der EDZ analysiert werden soll. In diesem Zusammenhang ist auch die Beteiligung an den Erhitzerversuchen in Bure und Äspö zu sehen, die sowohl die geotechnische als auch die Wirtsformation signifikant thermisch belasten.

Bei organischen Bestandteilen führt eine Temperaturerhöhung zu einer Reifung im Hinblick auf eine Kohlenwasserstoffgenese. Die Reifung organischer Substanz wird anhand von Modellberechnungen quantifiziert. Auch Umwandlungsreaktionen werden durch Temperaturerhöhung beschleunigt und verändern so den chemisch/mineralogischen Stoffbestand des Gesteins. Diesbezügliche Untersuchungen sollen als Basis dienen, um abzuschätzen, mit welchen Veränderungen man durch den Temperaturimpuls rechnen muss.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Thermische Optimierung einer geotechnischen Barriere durch Zusatzstoffe
- AP2: THM-Gesteinsverhalten im Einlagerungsbereich / EDZ und Bohrlochstabilität
- AP3: Veränderung organischer Bestandteile
- AP4: Veränderung anorganischer Bestandteile
- AP5: Mine-by Test in Mont Terri
- AP6: TED-Experiment in Bure
- AP7: TBT-Versuch in Äspö
- AP8: Optimierungsverfahren zur Parameteridentifizierung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP6 / AP8:

Im Berichtszeitraum wurden mit dem numerischen 3D-Modell zur rechnerischen Simulation des im französischen Untertagelabor Bure durchgeführten mehrphasigen Erhitzerversuches TED (Expérience thermique deux) eine Reihe von Temperaturrechnungen durchgeführt, um das sich ausbreitende Temperaturfeld zu simulieren. Die Identifikation der thermischen Gesteinsparameter wurde mit dem Softwaretool „OptiSLang“ durchgeführt. OptiSLang übernimmt dabei die gesamte Steuerung des Prozesses dergestalt, dass OptiSLang die Eingangsparameter eigenständig statistisch variiert und anschließend einen neuen Rechenlauf startet. Dieser Prozess führte letztlich zu einem Parametersatz, der es ermöglicht, die aufgezeichneten Messwerte an allen Sensoren bestmöglich nachzubilden.

Die Ergebnisse wurden im Rahmen eines Arbeitstreffens bei der ANDRA mit den anderen Arbeitsgruppen und dem Modellierungsteam diskutiert. Dabei wurde insgesamt eine gute Übereinstimmung der identifizierten Gesteinsparameter aller Modellierungsteams festgestellt. Dies belegt, dass die aus den Ergebnissen abgeleiteten thermophysikalischen Gesteinsparameter mit guter Genauigkeit bestimmt werden konnten. Die Entwicklung des Temperaturfeldes und damit die treibende Kraft für hydraulische und mechanische Prozesse kann somit gut prognostiziert werden.

Anschließend wurde damit begonnen, ein 3D-thermo-hydro-mechanisch gekoppeltes Modell mit FLAC3D zu entwickeln, um neben der Temperatúrausbreitung insbesondere auch das thermisch induzierte hydraulische Gesteinsverhalten zu charakterisieren. Parallel dazu wurde ein Unterauftrag an die Firma dynardo vergeben. dynardo soll ebenfalls ein 3D-thermo-hydro-mechanisch gekoppeltes Modell erstellen, aber mit dem Computercode ANSYS/Multiplas. Mit beiden Modellen soll eine bestmögliche Anpassung der thermisch induzierten Porenwasserdruckentwicklung im Modellgebiet erreicht werden. Die Bearbeitung mit Hilfe unterschiedlicher Codes - aber ansonsten gleichen Modellen - soll insbesondere die Unsicherheit, mit der eine modellgestützte Identifizierung durchgeführt werden kann, herausgearbeitet werden. Erste Ergebnisse mit ANSYS deuten darauf hin, dass die thermisch bedingten Porenwasserdruckänderungen brauchbar simuliert werden können.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP6: Durchführung von Prognoseberechnung für die weiteren Phasen des TED-Erhitzerversuchs in Bure.

Durchführung thermo-hydro-mechanischer Berechnungen zur Analyse der thermisch induzierten Porenwasserdruckentwicklung.

AP7: Entwicklung eines diskontinuierlichen Modells zur Beschreibung des hydromechanischen Verhaltens des kompaktierten Bentonits.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10156
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 705.892,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Bernhard	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens sind Beiträge für zuverlässige Prognosen zur Ausbreitung von Actiniden in Tongesteinen in Gegenwart von Huminstoffen (HS) und Tonorganika. Es sollen die Wechselwirkungen zwischen Actiniden (U, Am), HS und einem natürlichen Tongestein untersucht werden. Die Arbeiten gliedern sich in Komplexbildungsuntersuchungen sowie Batch- und Diffusionsexperimente im System Actinid-(HS)-Tongestein-Wasser. Die Datenbasis zur U(IV)/U(VI)-HS-Komplexierung soll vervollständigt werden. Erkenntnisse zum Einfluss N- und S-haltiger HS-Funktionalitäten auf die Metallionen-Komplexierung sind zu erwarten, die der abschließenden Einschätzung der Rolle verschiedener HS-Funktionalitäten bei der Metallionen-Komplexierung dienen. Quantitative Daten zur Sorption/Migration sowie qualitative Daten zu gebildeten Oberflächenkomplexen und Transport bestimmenden Prozessen werden generiert. Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Förderprojekten der Universitäten Mainz, Saarbrücken, München, Potsdam, Heidelberg, des Instituts für Interdisziplinäre Isotopenforschung Leipzig und des Instituts für Nukleare Entsorgung Karlsruhe.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Synthese stickstoff- und schwefelhaltiger Huminsäure-Modellverbindungen und spektroskopische Charakterisierung der Heteroatom-Funktionalitäten
- AP2: Untersuchung des Einflusses stickstoff- und schwefelhaltiger Funktionalitäten auf die U(VI)- und Am(III)-Komplexierung mit Huminsäuren und organischen Modellliganden
- AP3: Bestimmung der Konzentrations- und Temperaturabhängigkeit der Komplexbildungskonstante für die U(VI)-Huminsäure-Komplexierung
- AP4: Untersuchung der Bildung ternärer U(VI)-Carbonato-Humat-Komplexe
- AP5: Untersuchung der U(IV)-Komplexierung durch Humin- und Fulvinsäuren
- AP6: Identifizierung der für die Komplexierung von Actiniden in verschiedenen Oxidationszuständen relevanten funktionellen Gruppen der Huminstoffe
- AP7: Quantifizierung und Charakterisierung der von Tonen freigesetzten anorganischen und organischen Kolloide
- AP8: Untersuchungen zur U(VI)-Sorption an Opalinus-Ton und zum Einfluss von Huminstoffen auf die U(VI)-Sorption
- AP9: Diffusionsexperimente zum U(VI)-Transport in Opalinus-Ton

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Die U(VI)-Komplexierung durch Citronensäure wurde im pH-Bereich 0 - 10 in Abhängigkeit von der Temperatur (10 - 60 °C) mittels UV/Vis-Spektroskopie untersucht. Die $\log \beta$ -Werte der vier in Abhängigkeit vom pH-Wert spektroskopisch nachgewiesenen Komplexe steigen im Temperaturbereich 10 - 60 °C um ungefähr eine Größenordnung. Die U(VI)-Citrat-Komplexierung ist endotherm (ΔH pos.) und Entropie gesteuert (ΔS pos.).
- Die U(VI)-Komplexierung durch Benzolsulfonsäure (BSS) bzw. Phenolsulfonsäure (PSS) wurde bei pH 2.4 mittels TRLFS ($\lambda_e = 410$ nm) bei RT untersucht. Es wurden jeweils 1:1-Komplexe mit $\log K$ (BSS) = 2.62 ± 0.07 und $\log K$ (PSS) = 2.67 ± 0.03 ermittelt.
- Die für die U(VI)-Diffusion ($[U-233] = 1 \cdot 10^{-6}$ M) in Opalinuston ($\rho \sim 2.4$ g/cm³) in Abwesenheit und Gegenwart von Huminsäure ($[HS] = 10$ mg/L) unter anaeroben Bedingungen bei 25 und 60 °C erhaltenen Diffusionsprofile wurden mittels Comsolmodellierung ausgewertet.
- Für die U(VI)-Diffusion bei 25 °C wurden in Abwesenheit von HS ein D_e von $(1.9 \pm 0.4) \cdot 10^{-12}$ m²/s und ein K_d von (0.025 ± 0.003) m³/kg und in Anwesenheit von HS ein D_e von $(1.2 \pm 0.3) \cdot 10^{-12}$ m²/s und ein K_d von (0.020 ± 0.003) m³/kg bestimmt. Somit kann der K_d -Wert der U(VI)-Sorption an Opalinuston bestätigt werden und eine Reduktion (erhöhter K_d) von U(VI) zu U(IV) ausgeschlossen werden. HS zeigte innerhalb der Fehlergrenzen keinen signifikanten Einfluss auf die U(VI)-Diffusion in Opalinuston. Für die HS-Diffusion bei 25 °C wurden die Diffusionsprofile von zwei HS-Spezies beobachtet und als große und kleine HS-Moleküle deklariert. Für die großen HS-Moleküle wurde ein D_e von $(6.5 \pm 2.5) \cdot 10^{-13}$ m²/s und ein K_d von (0.129 ± 0.018) m³/kg ermittelt. Der K_d -Wert stimmt mit dem HS- K_d -Wert aus den Sorptionsuntersuchungen mit Opalinuston überein. Die kleinen HS-Moleküle diffundierten innerhalb der drei Monate durch das Tonstück und wurden im low-Konzentrationsreservoir nachgewiesen ($D_e = (4.0 \pm 2.5) \cdot 10^{-13}$ m²/s; $K_d = (0.002 \pm 0.0005)$ m³/kg).
- Bei 60 °C traten bei der HS-Diffusion erneut zwei HS-Spezies auf. Auch für die U(VI)-Diffusion wurden nun in Ab- und Anwesenheit von HS jeweils zwei Diffusionsprofile beobachtet, was auf eine Speziationsänderung hindeutet. Die in Abwesenheit von HS auftretende erste Uran-Spezies ($D_e = (3.0 \pm 1.0) \cdot 10^{-12}$ m²/s; $K_d = (0.25 \pm 0.05)$ m³/kg) stimmt in ihrem K_d -Wert mit dem K_d -Wert der U(VI)-Sorption an Opalinuston bei 60 °C überein. Für die zweite Uran-Spezies konnten ein D_e von $(3.0 \pm 0.5) \cdot 10^{-12}$ m²/s und ein K_d von (0.045 ± 0.005) m³/kg bestimmt werden. Für die U(VI)-Diffusion in Anwesenheit von HS wurden für die erste und zweite Uran-Spezies $D_e = (2.2 \pm 0.8) \cdot 10^{-12}$ m²/s und $K_d = (0.3 \pm 0.05)$ m³/kg bzw. $D_e = (2.5 \pm 0.5) \cdot 10^{-12}$ m²/s und $K_d = (0.05 \pm 0.005)$ m³/kg bestimmt. Auch bei 60 °C konnte kein signifikanter Einfluss von HS auf die U(VI)-Diffusion nachgewiesen werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Charakterisierung der im Opalinuston-Porenwasser bei 60 °C vorliegenden Uran-Spezies mittels TRLFS und PCS.
- Untersuchung der U(VI)-Komplexierung durch Citronensäure (pH 0 - 10; T = 10-60 °C) in Abhängigkeit von der Ionenstärke.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Joseph, C., Schmeide, K., Sachs, S., Brendler, V., Geipel, G., Bernhard, G.: Sorption of U(VI) onto opalinus clay in the absence and presence of humic acid in opalinus clay pore water. *Chem. Geology* 284, 240-250 (2011).

Sachs, S., Bernhard, G.: Humic acid model substances with pronounced redox functionality for the study of environmentally relevant interaction processes of metal ions in the presence of humic acid. *Geoderma* 162, 132-140 (2011).

Křepelová, A., Sachs, S., Bernhard, G.: Influence of humic acid on the Am(III) sorption onto kaolinite. *Radiochim. Acta* 99, 253-260 (2011).

Zuwendungsempfänger: Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 10166
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 798.450,00 EUR	Projektleiter: Prof. Reich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Sorption von Np und Pu an natürlichem Tongestein wird bei 25 °C und erhöhter Temperatur unter umweltrelevanten Bedingungen untersucht sowie der Einfluss von Huminstoffen auf die Sorption in Batch- und Diffusionsexperimenten studiert. Um die Wechselwirkungsprozesse auf molekularer Ebene zu verstehen, werden die dominierenden Sorptionsspezies mit Hilfe spektroskopischer Methoden (XPS, XANES und EXAFS) bestimmt. Wichtige Fragestellungen sind die Reversibilität und Kinetik der Sorption, der Einfluss der Temperatur sowie die Rolle von Huminstoffen und eventuell auch von Tonorganika. Diese Untersuchungen sollen die thermodynamische Datenbasis für Actiniden erweitern sowie Informationen zur Ableitung von Bewertungskriterien für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in Ton als Wirtsgestein, insbesondere über das Rückhaltevermögen von Tongestein gegenüber Radionukliden, liefern. Im Rahmen des Verbundprojekts wird schwerpunktmäßig mit dem Institut für Radiochemie des Helmholtz-Zentrums Dresden-Rossendorf, dem Institut für Nukleare Entsorgung des Karlsruher Instituts für Technologie und der Universität des Saarlandes zusammengearbeitet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Batchexperimente mit Np/Pu-Tongestein und Einfluss von Huminstoffen sowie Temperatur;
- Speziationsuntersuchungen in den Systemen Np/Pu-Tongestein mit XANES und EXAFS und in dem System Tongestein-Huminstoff mit XPS;
- Diffusionsexperimente mit Np und Pu in natürlichem Tongestein bei 25 und 60 °C sowie Einfluss von Huminstoffen;
- analytisch apparative Entwicklung, u. a. Kopplung CE-ICP-MS, CE-DAD und CE-RIMS.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Für die Sorption von Np(V) an OPA wurden die Verteilungskoeffizienten (K_d -Werte) sowohl in Batch- als auch in Diffusionsexperimenten bestimmt. Dazu wurden OPA-Pulver bzw. OPA-Bohrkerne unterschiedlicher Chargen verwendet. Bisher konnte nie vollständig ausgeschlossen werden, ob die beobachteten Unterschiede in den K_d -Werten möglicherweise aus einer unterschiedlichen Mineralogie der jeweiligen Ton-Charge resultieren. Daher wurde erstmals ein OPA-Bohrkern (BLT 14, Mont Terri, Schweiz) nach Beendigung des Diffusionsexperimentes pulverisiert ($\leq 150 \mu\text{m}$) und in einer Serie von Batch-Experimenten mit Np(V) eingesetzt. Auf diese Weise wurden die K_d -Werte für die Sorption von $8 \mu\text{M}$ Np(V) an OPA in Porenwasser ($\text{pH} = 7,6$; $I = 0,4 \text{ M}$) an Luft in An- und Abwesenheit von Huminsäure (HS, M42) sowie bei einer erhöhten Temperatur von 60 °C unter Variation des Feststoff/Flüssigkeit-Verhältnisses (2-20 g/L) bestimmt und mit den entsprechenden Werten des Diffusi-

onsexperimentes (46 ± 3 L/kg für Np(V)/OPA, 32 ± 2 L/kg für Np(V)/OPA/HS und 26 ± 1 L/kg für Np(V)/OPA/60 °C) verglichen. Die aus dem Batch-Experiment erhaltenen K_d -Werte betragen: 36 ± 11 L/kg für Np(V)/OPA, 22 ± 3 L/kg für Np(V)/OPA/HS und 181 ± 78 L/kg für Np(V)/OPA/60 °C. Bei der Diffusion traten keine wesentlichen Unterschiede im K_d -Wert auf; sowohl die Anwesenheit von HS, als auch die Erhöhung der Umgebungstemperatur auf 60 °C haben nur einen leichten mobilisierenden Effekt auf Np. Bei den Batch-Experimenten mit dem OPA-Pulver wurden bei Raumtemperatur in An- und Abwesenheit von Huminsäure nur geringfügig kleinere K_d -Werte als bei der Diffusion im Bohrkern erhalten. Bei 60 °C ist der K_d -Wert im Batch-Experiment jedoch um einen Faktor sieben größer als bei dem entsprechenden Diffusionsexperiment. Die Temperaturabhängigkeit der Wechselwirkungsprozesse von Np ist bei der Diffusion demnach deutlich geringer ausgeprägt als im Falle der Batch-Versuche.

Zur Speziation von Np(IV) und Np(V) in aquatischer Lösung wurde eine Methode mit CE-ICP-MS entwickelt. Die Kopplung einer selbstgebauten Kapillarelektrophoreseeinheit an die ICP-MS (Agilent 7500ce) erfolgte hierbei mit einem Parallel-Path Nebulizer (Brugener MiraMist CE). Mit dem beschriebenen Aufbau konnte gezeigt werden, dass eine Nachweisgrenze von ca. 1×10^{-9} mol/L Np erreichbar ist. Damit ist es möglich, die Redoxspeziation von Neptunium in Lösung im System Porenwasser-Ton bei tieferen Konzentrationen als bisher zu bestimmen.

Im April 2011 konnten die EXAFS-Untersuchungen zur Speziation von Pu an OPA abgeschlossen werden. Dazu waren mehrere Proben mit Pu in den Oxidationszuständen III, IV, V und VI unter aeroben und anaeroben Bedingungen in Porenwasser bei pH 7,6 präpariert worden. Die XANES-Messungen an der Pu $L_{2,3}$ -Kante ergaben, dass Pu unabhängig von seinem Ausgangsoxidationszustand in Lösung als Pu(IV) an dem Tongestein sorbiert wird. Zusätzlich zeigten die EXAFS-Spektren Pu-Al/Si bzw. Pu-Fe Wechselwirkungen, die auf eine innersphärische Sorption von Pu(IV) an verschiedenen in OPA enthaltenen Mineralien deuten. Außerdem wurde ein deutlicher Unterscheid zwischen aerob und anaerob aufbereitetem OPA-Pulver bezüglich der Pu-Sorption festgestellt. Damit konnten offene Fragen beantwortet werden, die sich aus den EXAFS-Messungen vom Oktober 2010 ergeben hatten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Laufzeit des Projektes endete am 30.06.2011. Das Diffusionsexperiment mit Pu und die Auswertung der Pu EXAFS-Daten werden abgeschlossen und die Ergebnisse für eine Publikation vorbereitet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

D.R. Fröhlich, S. Amayri, J. Drebert, T. Reich, Sorption of neptunium(V) on Opalinus Clay under aerobic/anaerobic conditions, *Radiochimica Acta* 99 (2011) 71-77.

S. Amayri, A. Jermolajev, T. Reich, Neptunium(V) sorption on kaolinite, *Radiochimica Acta* 99 (2011) 349-357.

D.R. Fröhlich, S. Amayri, J. Drebert, T. Reich, Influence of temperature and background electrolyte on the sorption of neptunium(V) on Opalinus Clay, *Applied Clay Science* (eingereicht).

D.R. Fröhlich, S. Amayri, J. Drebert, J. Krause, T. Reich, Uptake of Np(V) by natural clay – A micro-scale spectroscopic study, Vortrag auf der 41èmes Journées des Actinides, 09.-12.04.2011, Stará Lesná, Slowakei.

T. Reich, Environmental chemistry of plutonium, Vortrag auf der Actinide-XAS-2011, 02.-04.03.2011, Harima Science Garden City, Hyogo, Japan.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10176
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Beiträge zur Modellierung des Actinidentransports in potentiellen Wirtsgesteinsformationen; Teilthema 1: Mobilitätsbestimmende Elementarprozess; Teilthema 2: Einfluss heterogener Strukturen auf den Lösungs-Kolloidtransport		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.146.371,00 EUR	Projektleiter: Dr. Lippold	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zielsetzung des Gesamtvorhabens besteht zum einen in der Bereitstellung von Bewertungsgrundlagen zum Einfluss organischer Kolloide auf die Migration von Actiniden in Tongestein. Dazu wird die Koadsorption an Tonmineralien und an natürlichem, organikhaltigem Ton in Abhängigkeit von geochemischen Parametern untersucht und modelliert. Mit Hilfe von Radiotracermethoden sollen die Voraussetzungen für eine Rekonstruktion ternärer Systeme anhand von Gleichgewichtsdaten binärer Systeme im Einzelnen geprüft werden.

Ziel ist außerdem die tomographische räumliche und zeitliche Erfassung von Konzentrationsverteilungen während des Transports von Lösungen und Kolloiden in Modellprobekörpern und Bohrkernen aus Ton, Tongestein und Kristallingestein, um realistische Transportparameter und Kalibrierdaten für die Entwicklung verbesserter Prognosemodelle zur Sicherheit nuklearer Endlager zu schaffen.

Das Projekt ist Bestandteil des Verbundvorhabens „Wechselwirkung und Transport von Actiniden im natürlichen Tongestein unter Berücksichtigung von Huminstoffen und Tonorganika“.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Untersuchung der Auswirkung niedermolekularer Tonorganika auf die Adsorption radiotoxischer Schwermetalle an Opalinuston
- AP2: Untersuchungen zur Aufklärung kinetischer Effekte bei der Wechselwirkung höherwertiger Metalle mit natürlichem organischem Material
- AP3: Längerfristige PET-Untersuchung heterogener Diffusionsprozesse in intakten Opalinuston-Proben bei Standardbedingungen
- AP4: Vergleichsuntersuchungen analog AP3 bei veränderten Zustandsbedingungen
- AP5: Prozessmodellierung für heterogene Diffusionsprozesse im realen Material

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die genauere Analyse der bisherigen Diffusionsuntersuchungen an Bohrkernen mit PET ergab, dass Restgase aus dem Gesteinsvolumen punktuell in die zentrale Injektionsbohrung strömten, während die Tracerlösung flächenhaft aus der Bohrung abgegeben wurde. Ein derartiger Zweiphasenfluss anstelle einer langsamen Diffusion ist auch in Auflockerungszonen möglich und verdient eingehendere Untersuchungen. Nach erneuter Nachsättigung der Proben und Abklingen der bisher injizierten Aktivität ($[^{124}\text{I}]\text{NaI}$) wurden weitere Versuche mit dem langlebigeren Tracer $[^{22}\text{Na}]\text{NaCl}$ in synthetischem Opalinuston-Porenwasser durchgeführt. Anhand der PET-Bilder konnte im Verlauf von etwa zwei Monaten eine Ausbreitung des Tracers in einer Vorzugsebene um etwa 2 cm nachgewiesen werden (nicht jedoch in den dazu senkrechten Richtungen), ohne dass sich weiteres Gas in der Bohrung ansammelte. Zur vollständigen Charakterisierung der räumlichen Ausbreitung wird das Experiment fortgeführt. Das stark anisotrope und heterogene Ausbreitungsverhalten demonstriert die Notwendigkeit räumlich aufgelöster Tracer-Transportexperimente zur Charakterisierung des Materials als geologische Barriere.

Untersuchungen zur Desorptionskinetik von Humin- und Fulvinsäuren in Relation zur Austauschkinetik an gesättigten Tonmineral-Oberflächen erbrachten noch keine endgültigen Resultate und werden unter veränderten Versuchsbedingungen fortgesetzt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Schlussberichts (Projektabschluss zum 30.06.2011).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		Förderkennzeichen: 02 E 10186
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2011		Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011
Gesamtkosten des Vorhabens: 732.546,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Rösch

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

- Quantenmechanische Modellierung der Komplexierung von Aktinoidenspezies durch Huminstoffe.
- Quantenmechanische Modellierung der Sorption von Aktinoidenspezies an Tonmineraloberflächen.
- Weiterentwicklung von Solvatationsmodellen.

Bezug zu anderen Vorhaben:

Teilprojekt im Verbund „Actinidenmigration im natürlichen Tongestein“.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete:

AP1: Sorption an Tonmineralien

Das AP1 umfasst quantenmechanische Berechnungen periodischer Modelle von Tonmineralien sowie computerchemische Untersuchungen zur Adsorption von Aktinoidenspezies auf Tonmineraloberflächen mit Hilfe dieser Modelle.

AP2: Komplexierung durch Huminstoffe

In AP2 werden computerchemische Untersuchungen zu Komplexen von Actinoiden in wässriger Lösung durchgeführt. Schwerpunkte sind die Modellierung der Komplexierung durch natürliche Organika wie etwa Huminstoffe und die Untersuchung anorganischer Komplexe von Americium.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1: Charakterisierung Tonminerale; AP1.2: Adsorption an Tonmineralen; AP2.2: Temperaturabhängigkeit thermodynamischer Parameter; AP2.3: Komplexierung von Am(III).

Die Modellierung geladener Tonminerale wurde für prototypische dreischichtige Modellminerale mit einer ladungserzeugenden Substitution pro zwei Formeleinheiten Pyrophyllit fortgesetzt (APe 1.1, 1.2). Neben der bereits betrachteten beidellitischen (BS) wurde nun auch die montmorilloniti-

sche Substitution (MS) betrachtet. Uranyl(VI) adsorbiert auf der (001)-Oberfläche beider Modellminerale bevorzugt außersphärisch. Dies ist überraschend, da im Falle der BS der geladene Defekt an der tetraedrischen Oberflächenschicht liegt, während für MS das Ladungszentrum im inneren des Minerals, in der Oktaederschicht, liegt. Ebenso wird für beide Modellminerale monogegenüber bidentater Adsorption auf der (001)-Oberfläche bevorzugt. Dies deutet darauf hin, dass das gefundene qualitative Adsorptionsverhalten wesentlich elektrostatisch bestimmt ist, was durch eine Ladungsanalyse zu untermauern wäre. Neu sind Modellierungen der (010)-Kantenfläche geladener Tonminerale. In diesen Modellen wurden die geladenen Defekte durch zusätzliche Protonen auf der Oberfläche neutralisiert. Solvatisierung dieser Oberflächen, modelliert durch eine Monolage Wasser, führt zur Ablösung eines Aqualiganden von einem Al^{3+} -Zentrum und damit zur einer Modifikation der Oberflächenstruktur, wenn der geladene Defekt nicht direkt an der Oberfläche liegt. Die Adsorption von Uranyl(VI) wird derzeit für beide Modellminerale und verschiedene Positionen des geladenen Defekts untersucht. Bisher wurden bidentat koordinierte Spezies auf Aluminol- und gemischten Aluminol-Silanol-Plätzen auf Oberflächen ohne Wasserbedeckung optimiert. Bereits hier zeigt sich, wie bei Kantenflächen des Kaolinit, dass Monohydroxidspezies des Uranyls entstehen können. Neu ist der Befund, dass Protonen der Oberflächengruppen durch die Adsorption verdrängt werden können; damit ist eine Modifikation des Adsorptionsplatzes durch das Feld des Uranylions möglich.

Die Temperaturabhängigkeit der Komplexierung von Uranyl(VI) wurde am Beispiel eines Acetatliganden im Bereich 25–90 °C modelliert (AP2.2). Da einfache Modellgleichungen, die das Acetat-Ion enthalten, nur qualitative Resultate ergaben, wurde eine Reihe verbesserter Modelle unter Verwendung der protonierten Essigsäure sowie des experimentellen pK_a -Wertes untersucht. Dabei ist insbesondere die Darstellung des solvatisierten Protons wichtig. Alle Modelle sagen in Übereinstimmung mit dem Experiment eine leichte Erhöhung der Komplexierungskonstante mit steigender Temperatur voraus. Dieser Effekt wird nur für den bidentaten Komplex erhalten. Damit verschiebt sich das Gleichgewicht zwischen mono- und bidentaten Komplexen mit steigender Temperatur hin zur bidentaten Spezies. Recht gute absolute Werte für die Gibbs'sche freie Energie der entsprechenden Reaktion wurden erhalten, wenn man die experimentelle Solvatationsenergie des Protons verwendet.

Die Strukturen diverser Am(III)-Aquakomplexe (AP2.3) mit 8–10 Liganden, bisher nur mit Symmetriebeschränkungen betrachtet, wurden vollständig optimiert. Dabei bestätigte sich, dass eine 8-fache Koordination für Am(III) bevorzugt ist, während in der Literatur der Wert 9 favorisiert wird. Andererseits stimmen geometrische Parameter zwischen Experiment und Theorie besser für die Koordinationszahl 10 überein. Derzeit laufende Rechnungen an Am(III)-Monoacetat zum Anschluss an Experimente an der TU Dresden deuten ebenfalls auf 8 als bevorzugte Koordinationszahl für innersphärische bidentate Komplexe hin. Für U(IV) und Np(IV) (APe 1.2, 1.5 alt) wurden die Arbeiten zu den Aqua-Ionen systematisch auf Monohydroxide erweitert. Die Modellierung von Acetatkomplexen ist geplant.

4. Geplante Weiterarbeiten

Derzeit noch laufende einzelne Arbeiten aus diesem Projekt (siehe oben) werden abgeschlossen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Universität des Saarlandes, Campus der Universität des Saarlandes, 66123 Saarbrücken		Förderkennzeichen: 02 E 10196
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Untersuchungen zur Migration von Lanthaniden und Uran in natürlichen Tonformationen im Übergang von verdünnten Mineral-Suspensionen zu kompakten Tonen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 695.507,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Beck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Forschungsvorhabens ist die Untersuchung des Einflusses verschiedener geochemischer Parameter (Konzentration an Metallen, pH, Konkurrenzen oder organische Komplexliganden) auf die Sorption und Desorption von Uran sowie Lanthaniden (Europium, Terbium und Gadolinium) als deren Vertreter in Opalinuston. Die dabei erhaltenen Ergebnisse zur Migration der untersuchten Metalle an Opalinuston werden mit den aus Vorgängerprojekten erhaltenen Daten für das Modellmineral Kaolinit verglichen. Im zweiten Projektabschnitt wird mit Hilfe von miniaturisierten Säulenversuchen das Ausbreitungsverhalten der untersuchten Lanthaniden in Gegenwart verschiedener Modell- bzw. natürlich vorkommender Tonorganika (Salicylat, Citrat, Lactat sowie Huminsäure) unter Variation geochemischer Einflüsse in kompaktiertem Tonstein untersucht.

Von den in diesem Verbund tätigen Institutionen haben wir eine besondere thematische Nähe und Kooperation mit folgenden Einrichtungen: Institut für Nukleare Entsorgung des FZKA; Institut für Radiochemie des FZD; Institut für Kernchemie der Johannes-Gutenberg-Universität Mainz; Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung in Leipzig und dem Institut für Physikalische Chemie der Universität Potsdam.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Auswahl und Charakterisierung eines natürlichen Tongesteins
- AP2: Batch-Versuche zur Bestimmung der Einflüsse geochemischer Parameter auf die Sorption von Lanthaniden und Radionukliden (Eu, Gd bzw. Tb und U) in natürlichen Tonformationen inklusive der darin enthaltenen Organika
- AP3: Batch-Versuche zur Untersuchung der Einflüsse von organischen Modellstoffen und natürlich vorkommenden tonorganischen Stoffen auf die Metall-Desorption bei natürlichem Tongestein
- AP4: Aufbau und Optimierung eines miniaturisierten Säulenversuchs und Vergleich der Ergebnisse des Säulenversuchs mit denen aus Batch- und Diffusions-Versuchen. Bestimmung wichtiger Parameter auf das Migrationsverhalten der Metalle im nativen Tongestein
- AP5: Räumlichen Verteilung und Ausbreitungsverhaltens der Schwermetalle und Tonorganika durch eine orts aufgelöste Analytik der Tonsäulen
- AP6: Extraktion und Charakterisierung von mobilen bzw. mobilisierbaren Tonorganika aus Opalinuston
- AP7: Untersuchung des Einflusses von unterschiedlichen Temperaturen auf die Metall-Sorption und Desorption an Tonstein und der enthaltenen Organika
- AP8: Simulation verschiedener Temperatur- und Druck-Szenarien mit den entwickelten miniaturisierten Säulenversuchen zur Untersuchung von kinetischen Effekten bei der Sorption und Mobilisierung von Metallen in kompaktem Tonstein durch enthaltene Tonorganika

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde das Sorptionsverhalten von Uran(VI) für Konzentrationen zwischen $2,1 \cdot 10^{-8}$ und $4,2 \cdot 10^{-4}$ M U(VI) an Opalinuston (OPA) bei 25 und 60 °C in synthetischem Porenwasser (PW) untersucht. Im ternären System mit Lactat und Huminsäure als Modellspezies für Tonorganika konnte beobachtet werden, dass die Organik keinen relevanten Einfluss auf die U(VI)-Sorptionsverhalten hat. Der Einfluss erhöhter Temperatur war jedoch im Gegensatz zum Einfluss der Organik höher. So konnte durch Erhöhen der Temperatur von 25 auf 60 °C eine um 15 % erhöhte Sorption beobachtet werden, ähnlich den Ergebnissen mit den Lanthanoiden (Eu, Gd und Tb). Während bei erhöhten Temperaturen (60 °C) ebenfalls kein Einfluss des Lactats auf die U(VI)-Sorptionsverhalten an OPA beobachtet werden konnte, erhöhte sich die Sorption bei Anwesenheit von Huminsäure bei 60 °C in Abhängigkeit der vorliegenden U(VI)-Konzentration zwischen 60 % ($1,1 \cdot 10^{-5}$ M U(VI)) und 75 % ($2,1 \cdot 10^{-6}$ M U(VI)). Im Vergleich dazu konnte bei Europium der Einfluss von Organik bei erhöhten Temperaturen vollständig vernachlässigt werden. Die erhaltenen Ergebnisse deuten darauf hin, dass die Speziation des Uranyl in Gegenwart von Huminsäure stark durch die Temperatur beeinflusst wird. Bei 60 °C ist die U(VI)-Komplexierung durch HA dominant, was in Porenwasser zu einer Ausfällung von Uranyl-Humaten führt. Diese Ausfällung wird als höhere Sorption wahrgenommen und sollte in weiterführenden Untersuchungen genauer belegt werden, wie beispielsweise durch TOC- oder UV/Vis-Messungen der Huminsäure-Konzentration in Lösung.

Zusätzlich wurden Desorptionsuntersuchungen von Europium ($2,0 \cdot 10^{-6}$ M Eu(III)) bei unterschiedlichen pH-Werten und bei unterschiedlichen Temperaturen von OPA in PW durchgeführt. Dabei wurde vor allem eine Änderung der Temperatur im Endlager als Vorbild genommen. Neben den Sorptions- und Desorptionsversuchen bei gleicher Temperatur (jeweils 25 oder 60 °C) wurde nach der Eu-Sorption die Temperatur entweder erhöht (von 25 auf 60 °C) oder erniedrigt (von 60 auf 25 °C). Mit den Versuchen bei konstanter Temperatur konnte gezeigt werden, dass eine erhöhte Temperatur, wie sie auch in einem Endlager vorkommen kann, zu einer erhöhten Metall-Sorption und zu einer verringerten Desorption von OPA führen könnte. Findet die Metall-Sorption, wie hier am Beispiel des Europiums, jedoch bei 60 °C, die anschließende Desorption aber bei 25 °C statt, wird weniger Europium vom Opalinuston remobilisiert (- 7 %) als hätte die Sorption von Eu ebenfalls bei 25 °C stattgefunden. Der Sorptionsprozess ist somit unter den gegebenen Versuchsbedingungen nicht vollständig reversibel. Eine Veränderung der Tonoberfläche durch erhöhte Temperaturen ist nicht auszuschließen, wenn auch über röntgendiffraktometrische Untersuchungen keine messbaren Veränderungen in der Ton-Bulkstruktur nachgewiesen werden konnten. Die Desorptionsversuche mit Europium wurden im binären sowie im ternären System mit Lactat und Huminsäure durchgeführt. Dabei konnte festgestellt werden, dass der Einfluss der eingesetzten Modellorganika in Desorptionsversuchen bei höheren Temperaturen (60 °C) im Gegensatz zu 25 °C zu vernachlässigen ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Projekt endete zum 30.06.2011. Weitere Fragestellungen werden in einem nachfolgenden Projekt bearbeitet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kautenburger, R., Möser, C. & H.P. Beck (2011): Metal Migration in Natural Clay Formations - Speciation of Europium, Gadolinium and Uranium with NOM. European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry 2011, Zaragoza, 135 (Vortrag).

Kautenburger, R., Möser, C. & H.P. Beck (2010): Influence of Lanthanide Concentration and the Presence of Competing Metal Ions on Europium and Gadolinium Speciation with Humic Acid Analyzed by CE-ICP-MS. In: Advances in Natural Organic Matter and Humic Substances Research 2008-2010 (Eds: J.A. González-Pérez, F.J. González-Vila & G. Almendros). Proceedings IHSS 15 (Vol. 1), 251-254.

Möser, C., Kautenburger, R. & H.P. Beck (2010): CE-ICP-MS as Speciation Technique to Analyze the Complexation Behavior of Europium, Gadolinium and Terbium with Humic Acid. In: Advances in Natural Organic Matter and Humic Substances Research 2008-2010 (Eds: J.A. González-Pérez, F.J. González-Vila & G. Almendros). Proceedings IHSS-15 (Vol. 3), 139-142.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10206
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.085.140,00 EUR	Projektleiter: Dr. Marquardt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Untersucht wird das Migrationsverhalten von Actiniden in der natürlichen Tonbarriere. Hierbei sollen die relevanten Prozesse auf molekularer Ebene aufgeklärt und verstanden werden. Neben der eingehenden Charakterisierung von Tonmineralien und der darin enthaltenen Tonorganika werden deren Wechselwirkungen mit Actinidionen untersucht. Notwendige Grundlagenuntersuchungen werden parallel durchgeführt, hinsichtlich Komplexierung der Actiniden mit Tonorganika und Huminstoffen. In der Verlängerungsphase werden die Arbeiten auf Untersuchungen niedermolekularer organischer Substanzen und pH-Messungen bei höheren Temperaturen ausgedehnt. Zusammenarbeiten laufen mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, der Universität Mainz, Potsdam, Heidelberg, Köln, Universität des Saarlandes sowie der TU München.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Die Rolle der niedermolekularen Komponenten (Formiat, Acetat, Propionat, Laktat und andere) bei der Diffusion von Radionukliden in OPA;
- AP2: Der Einfluss von Kerogen auf die Diffusion/Sorption von Actiniden (An) in/an OPA;
- AP3: „Post mortem“-Analysen von Diffusionsexperimenten, die wegen technischer Schwierigkeiten in der laufenden Projektphase wiederholt werden müssen;
- AP4: pH-Messung bei erhöhten Temperaturen;
- AP5: Untersuchungen zur Sorption und Redoxverhalten von Np, Pu und Tc im OPA und Cox-System.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Komplexierung von tetravalenten Actiniden mit Humin- oder Fulvinsäure bzw. Tonorganika ist bisher nicht geklärt, da es einige experimentelle Schwierigkeiten gibt, hervorgerufen durch Eigenkolloidbildung durch Hydrolyse, starke Sorptionsphänomene und Redoxreaktionen. Aus diesem Grund wurden weitere grundlegende Untersuchungen der Np(IV)-Komplexierung mit Fulvinsäure (FA) im pH-Bereich 1 bis 3 unternommen. Da zur Charakterisierung der Proben weitgehend spektroskopische Methoden verwendet werden soll, wurden drei unterschiedliche Ansätze zur Bildung von Np(IV)-Fulvat (Np(IV)FA) durchgeführt, mit dem Ziel der Minimierung der Hydrolyse. 1. Np(IV) wird in stark saurer Lösung aus Np(V) elektrolytisch gebildet, mit FA versetzt und der gewünschte pH eingestellt. 2. Elektrolytisch gebildetes Np(III) wird mit FA versetzt und der gewünschte pH eingestellt. Durch langsame Oxidation mittels Spuren von Sauerstoff bildet sich Np(IV), welches sofort mit FA

einen Komplex bilden sollte. 3. Es wird ein Fulvatkomplex mit fünfwertigem Np bei pH 9 hergestellt und anschließend das Np im Fulvatkomplex mittels Natriumdithionit reduziert und der gewünschte pH eingestellt. Alle Lösungen wurden mittels Absorptionsspektroskopie (UV-Vis-NIR), Photoelektronenspektroskopie (XPS) und Röntgenabsorptionsspektroskopie (EXAFS/XANES) charakterisiert. Die NIR-Absorptionsspektroskopie zeigt zwei Absorptionsmaximum bei 968 und 975 nm, die zwei Spezies zugeordnet werden. Die Intensität der Banden hängt ab von dem Konzentrationsverhältnis der totalen Np-Konzentration $[\text{Np(IV)}]_{\text{total}}$ zur totalen FA-Konzentration $[\text{FA}]_{\text{total}}$ und dem pH-Wert. Bei niedrigen $[\text{Np(IV)}]_{\text{total}} / [\text{FA}]_{\text{total}}$ und pH 3 dominiert die Spezies bei 975 nm. Augenscheinlich existiert bei pH 3 nur eine Hauptspezies, ungeachtet der Präparationsmethode. Dies wird durch XPS bestätigt, welches für alle Proben sehr ähnliche Spektren zeigt mit gleichen Bindungsenergien für die $4f_{5/2}$ und $4f_{7/2}$ Elektronen. Auch die XANES-Spektren sind für alle Proben sehr ähnlich und zeigen keinen Einfluss von Np-Eigenkolloide oder ungelöster Hydrolyse-Komponenten auf die weiße Absorptionslinie. EXAFS ergibt zwei O-Schalen mit Np-O-Abständen bei 2.20 - 2.24 Å für Hydroxylionen als Ligand und bei 2.40 - 2.44 Å. Hier handelt es sich um einen mittleren Np-O-Abstand von Wassermolekülen und Carboxylgruppen. Allerdings zeigen viele Spektren auch nur einen Abstand zwischen 2.32 bis 2.38 Å. Dieser Befund kann im Moment bezüglich der angewandten Präparationsmethode nicht erklärt werden. Np-Np-Wechselwirkungen wurden in keinen Proben gefunden. Damit kann kolloidales Np(IV) oder festes Np(IV)-Oxyhydroxid, welches durch oberflächen-sorbierte FA in Lösung stabilisiert wird, ausgeschlossen werden. Auch oligomere Komponenten können als Hauptkomponenten ausgeschlossen werden. Detaillierte Auswertungen im Zusammenhang mit früheren Komplexierungsstudien sollen in naher Zukunft ein konsistentes Bild der Np(IV)-FA-Komplexierung geben.

Die Untersuchungen zur Langzeit-Kinetik der Sorption an Tongestein (OPA, COx) bzw. des Redoxverhaltens der redox-sensitiven Radionukliden Np und Pu wurden fortgeführt. Das auf dem Ton sorbierte Np und Pu wurde mittels EXAFS/XANES und XPS charakterisiert und die Auswertungen der Messung nach einer Woche Reaktionszeit liegen nun vor. Auf der Oberfläche des Tons findet man Np(V) und Pu(IV). Der Oxidationszustand des eingesetzten fünfwertigen Neptuniums blieb in der relativ kurzen Reaktionszeit unverändert, während das Plutonium von Pu(V) zu Pu(IV) reduziert wurde. Die EXAFS Untersuchungen von Plutonium und Neptunium an OPA ergeben Pu-O, Np-O Abstände, die denen des Pu(IV) bzw. dem Np(V) entsprechen: Pu-O(1) = 2.26 Å, Pu-O(2) = 2.41; Np-O(1) = 1.87, Np-O(2) = 2.47. Anzumerken ist, dass man auch Pu-Pu-Wechselwirkungen bei 3.75 Å findet, die wahrscheinlich durch Hydrolyse des Pu(IV) hervorgerufen wird. Die Np(V)-Proben zeigen keine Metall-Metall-Wechselwirkungen, da für Np(V) keine Hydrolyse zu erwarten ist.

Das Actiniden-Komplexierungsverhalten von extrahierten OPA-Kerogen wurde mittels Cm-TRLFS getestet und es konnte eine Cm-Komplexierung bei pH 6 gemessen werden. Allerdings gestaltet sich die Interpretation der Messdaten auf Grund der hohen Anteile anorganischer Komponenten (0.22 wt % Al, 6.57 wt % Si, 4.01 wt % S und 7.48 wt % Fe) als schwierig. Weiterhin besteht die Unsicherheit der Funktionalisierung des natürlichen Kerogens auf Grund der gewählten harschen Extraktionsschritte zur Isolierung natürlichen Kerogens.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Charakterisierung der Sorptionsexperimente mittels EXAFS/XANES und XPS nach einer Reaktionszeit von ca. 9 Monaten.
- Post-mortem-Analysen der Diffusionsversuche mit verbesserter Technik.
- Abschluss aller experimenteller Arbeiten und Fertigstellung des Abschlussberichts zum 31.12.2011.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 10216
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Spektroskopische Untersuchungen zum erweiterten Prozessverständnis in binären und ternären Huminstoff-Tongestein - Lanthanoid Systemen: Thermodynamische und kinetische Kenngrößen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 413.157,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kumke	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im beantragten Forschungsvorhaben werden laserbasierte spektroskopische Methoden zur Untersuchung der Wechselwirkungen in ternären Systemen (weiter)entwickelt. Damit wird das Prozessverständnis in ternären Systemen auf molekularer Ebene erweitert und verbessert. Aus den experimentellen Arbeiten werden dann neue bzw. verbesserte thermodynamische und kinetische Kenngrößen zur Beschreibung der ternären Systeme ableitbar, die die Basis für ein umfassenderes Verständnis der molekularen Prozesse darstellen. Langzeitsicherheitsanalysen und Risikobewertungen von Endlagerstätten oder geologischen Barrieren werden durch das grundlegende Prozessverständnis so verlässlicher zu gestalten sein.

Das Projekt 02E10216 ist Teil des Verbundes „Wechselwirkung und Transport von Actiniden im natürlichen Tongestein unter Berücksichtigung von Huminstoffen und Tonorganika“. Thematisch eng verknüpft ist das Forschungsvorhaben mit den Teilvorhaben des Forschungszentrums Dresden-Rossendorf (AP1, AP2), des Instituts für Nukleare Entsorgung des FZK (AP1, AP2), der TU München (AP1) sowie des Instituts für Interdisziplinäre Isotopenforschung Leipzig (AP5).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Interlanthanoid-Energietransfer in binären und ternären Systemen
- AP2: Laser-Flash-Untersuchungen der Triplett-Zustände in binären und ternären Systemen
- AP3: Anisotropie von Huminstoffen in binären und ternären Systemen
- AP4: Kinetik der Sorption in binären und ternären Systemen (stopped-flow und Temperatursprung-Experiment)
- AP5: Konkurrenz-Reaktionen der Wechselwirkungen zwischen Ln(III) und anderen Metallionen

Arbeitspakete der Projektaufstockungsphase

- AP1-A: Modellliganden
- AP2-A: Tonorganika

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

(AP1-A) Die Komplexierung von Eu(III) durch Glykolsäure (und Salicylsäure) wurde bei verschiedenen Temperaturen (bis $T = 60\text{ °C}$) untersucht und auf weitere Modellliganden ausgedehnt. Dazu wurden Absorptions- und Emissionsspektren gemessen sowie Lumineszenzabklingzeiten des Europiums bestimmt. In den Versuchen wurde die Ionenstärke ($I = 10^{-2}$) und der pH-Wert ($\text{pH} = 5$) konstant gehalten. Als weitere Modellliganden wurden Anthranilsäure, Maltol, Deferipron und verschiedene α -substituierten Carbonsäure verwendet. Die grundlegenden spektroskopischen Daten (z. B. Absorptionsspektren, zeitaufgelöste Emissionsspektren, Transientenabsorption) und speziell die Lumineszenzparameter (Abklingzeit, Asymmetrie-

Verhältnis, spektrale Lage von Lumineszenzbanden) wurden für die Speziation bestimmt. Die untersuchten Modellliganden konnten in drei Klassen (A - C) eingeteilt werden, wobei in Klasse A bzw. B Modellliganden eingeordnet wurden, die die Lumineszenzabklingzeiten positiv beeinflussen bzw. sich neutral verhalten. In Klasse C sind Liganden eingeordnet, die zu einer Löschung der Lumineszenz führen. Diese liganden-spezifischen Effekte wurden für Komplexe mit Liganden der Klasse C weiterführend charakterisiert. Aus der Temperaturabhängigkeit der Lumineszenzabklingzeiten wurde über einen Arrhenius-Ansatz die Aktivierungsenergie der Löschung bestimmt. In dazu komplementären Transientenabsorptionsmessungen wurde für Salicylsäure (2HB) eine transiente Spezies nachgewiesen, die einem Ligand-zu-Metall-Ladungstransfer (LMCT) Zustand zugeordnet werden konnte. Untersuchungen zum Nachweis entsprechender LMCT Zustände für weitere Liganden der Klasse C werden momentan abschließend durchgeführt bzw. ausgewertet.

Das Gleichgewicht zwischen 8-fach und 9-fach komplexierten Eu(III)-Aquaspezies wurde in Tieftemperaturexperimenten ($T = 5 \text{ K}$) in H_2O und in D_2O als Lösungsmittel in Anwesenheit verschiedener Anionen bzw. Ionenstärken (bis $I = 6$) untersucht. Durch die Auswertung der STARK-Level-aufgelösten Emissionsspektren und der Lumineszenzabklingzeiten konnten für die Anionen die Unterschiede in der Komplexgeometrie und die bedingt durch ihre Polarisierbarkeit unterschiedlichen Auswirkung auf die Bindungsabstände bzw. Ausbildung der zweiten Koordinationssphäre beschrieben werden. Aus den Spektren (genauer aus den zero phonon lines) wurden fundamentale Parameter wie z. B. der Huang-Rhys-Faktor bestimmt, der die Stärke der Elektron-Phonon-Kopplung beschreibt. Mit der Bestimmung der Ligandenfeldparameter B_{20} und B_{22} für die verschiedenen Komplexe stehen damit auch Größen für eine direkte Korrelation von experimentellen und theoretischen Größen zur Verfügung.

(AP2-A) Die Lanthanide Eu(III) bzw. Tb(III) wurden an Mineraloberflächen adsorbiert. Mittels Variation der Konzentration der Ln(III)-Lösungen wurden Sorptionsisothermen erstellt. Des Weiteren wurden die Sorptionsexperimente in Gegenwart von Modellliganden (niedermolekulare aromatische und aliphatische Säuren) durchgeführt. Mittels Lumineszenzexperimente wurde die Sorption qualitativ und quantitativ beschrieben. Interlanthanid-Energietransferexperimente werden derzeit abschließend durchgeführt, um die Verteilung der sorbierten Ionen auf der Tonmineraloberfläche weiter zu charakterisieren. In Abwesenheit von Modellliganden wurden Untersuchungen des Interlanthanid-Energietransfers zwischen Tb(III) (Donor) und Nd(III) (Akzeptor) auf Kaolinit-Oberflächen abgeschlossen. Durch die Variation der Nd(III)-Konzentration ließ sich der mittlere Abstand zu sorbierten Tb(III)-Ionen verändern. Basierend auf Interlanthanid-Energietransfer-Messungen wurden für die untersuchten Proben Abstände von auf der Oberfläche sorbierten Ionen bis ca. 1 nm bestimmt. Untersuchungen unter Variation der Temperatur bis $T = 60 \text{ °C}$ zeigten keine Veränderung in der Energietransfereffizienz, d. h., der mittlere Abstand der Ionen auf der Oberfläche war unverändert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Forschungsvorhaben endet mit dem 30.6.2011. In Nachfolgeverbund „Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen“ werden im Teilprojekt 6 „Zum Molekularen Prozessverständnis der Wechselwirkungen von Lanthanoiden mit Komponenten homogener und heterogener salinärer Systeme“ neue, weiterführende Fragestellungen zur Thematik bearbeitet werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Christina Schimmeck; „Lumineszenzspektroskopische Charakterisierung von Tropolon und α -substituierten Benzoessäuren in Komplexen mit Europium (Arbeitstitel)“ (Bachelorarbeit, Beginn 1.6.2011).
 Karolina Jahn, Bettina Marmodée, Michael U. Kumke; „Fluorescence line narrowing spectroscopy of Europium(III) in H_2O and D_2O at high salinity conditions“, Manuskript in Vorbereitung.

Stefanie Kuke, Michael U. Kumke; „Radiative and non-radiative deactivation in complexes between Europium(III) and small organic ligands“, Manuskript in Vorbereitung.

Zuwendungsempfänger: Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Fahnenbergplatz, 79098 Freiburg		Förderkennzeichen: 02 E 10306
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 30.09.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 94.760,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kröner	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit der Entwicklung der Programmpakete d^3f und r^3t stehen Werkzeuge zur Modellierung der salzgetriebenen Dichteströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien zur Verfügung. Im Rahmen dieser Vorgänge haben die Arbeitsgruppen in Bonn und Freiburg Visualisierungswerkzeuge für die großen und komplexen Datensätze in 2D und vor allem in 3D entwickelt. Diese Werkzeuge sollen nun weiterentwickelt werden und den neuen Fragestellungen im Zusammenhang mit Kluftgeometrien und freien Oberflächen angepasst werden.

Diese Visualisierung soll hierarchisch konzipiert werden. D. h. in der interaktiven Exploration werden grobe Repräsentationen der Daten bereitgestellt, die effektiv in Echtzeit zeitlich animiert oder räumlich skaliert und gedreht werden können. Finale graphische Ergebnisse und Animationen sollen hingegen den vollen Detailreichtum der Simulationen widerspiegeln.

Die Datenanalyse dreidimensionaler zeitabhängiger Daten erfordert lokalisierte Techniken der Visualisierung. D. h. es soll möglich sein, an Raumpunkten über die Zeit oder auf Kurven in Raumzeit oder auch auf Domänengrenzen über die Zeit die Entwicklung skalarer oder vektorieller sowie akkumulierter Größen auszulesen und graphisch aufzubereiten.

Schon im Projekt r^3t wurden Multiskalen-Bildverarbeitungstechniken entwickelt, um die Strömungsfelder und den Transport von Schadstoffen visuell angemessen darzustellen und damit ein Verständnis der simulierten Prozesse zu ermöglichen. Diese Methoden sollen nun vor allem in Hinblick auf dreidimensionale Strömungen mit Schadstofftransport weiterentwickelt werden.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der GRS (Anke Schneider), der Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Bonn (Prof. Rumpf) und der Uni Heidelberg (Prof. Wittum) durchgeführt. Zusätzlich ist auch das Steinbeis-Forschungszentrum (Dr. Heisig) über einen Unterauftrag eingebunden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP9: Visualisierung und Datenanalyse (Arbeitsgruppe Kröner)

AP10: Visualisierung und Datenanalyse (Arbeitsgruppe Rumpf)

Schwerpunkt der Arbeitsgruppe Kröner ist hierbei die Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die hier zu entwickelnden numerischen Methoden zur Datenanalyse. Schwerpunkt der Arbeitsgruppe Rumpf ist die Entwicklung von hierarchischen Datenanalysemethoden und Postprocessing-Methoden basierend auf dreidimensionaler morphologischer Bildverarbeitung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Visualisierungsplattform GRAPE wurde im Kontext von neuen Datenformaten weiterentwickelt. Bearbeitet wurde das Projekt von Herrn Mirko Kränkel (AG Kröner).

Im Zusammenhang mit den Visualisierungswerkzeugen wurden folgende Arbeiten durchgeführt:

Im vergangenen Arbeitszeitraum wurden in erster Linie die entwickelten Darstellungsmethoden anhand realistischer Datensätze getestet. Insbesondere bei der Darstellung dreidimensionaler Kluftnetzwerke traten Schwierigkeiten auf, die in den einfachen Testfällen nicht vorhanden waren. Die Einleseroutinen mussten dahingehend angepasst werden, dass sich überschneidende Klüfte korrekt dargestellt werden. Außerdem wurde die Darstellung von Geschwindigkeitsfeldern der Strömung innerhalb der Klüfte sowohl in 2D als auch 3D implementiert. Mit den nun vorliegenden numerischen Ergebnissen, die bei Simulationen mit komplexer Geometrie entstanden sind, konnten die Visualisierungstools getestet und an realistische Anwendung angepasst werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Auftrag angegebenen Vorgehensweise weitergeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main		Förderkennzeichen: 02 E 10326
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Modellierung des Wärmetransports und Modellierung freier Oberflächen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 31.03.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 31.03.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 654.710,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Wittum	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Projekts ist es, die Modellierung des Wärmetransports in d^3f (AP6) und die Modellierung freier Oberflächen in d^3f und r^3t (AP8) einzubringen.

Zur Einbeziehung der Kopplung muss zusätzlich die Energiegleichung aufgestellt und in das Modell eingekoppelt werden. Zur Diskretisierung werden die bestehenden Finite-Volumen-Verfahren und Galerkin-Methoden herangezogen. Das entstehende algebraische System wird mit Hilfe von Mehrgitterverfahren voll gekoppelt gelöst. Hierzu muss das bestehende Lösungsverfahren erweitert und in wesentlichen Teilen neu entwickelt und implementiert werden. Alles muss in die Parallelisierung einbezogen werden. Zur Modellierung der freien Oberfläche muss zunächst eine stabile Beschreibung der freien Oberfläche und des ortsabhängigen Eintrags in den Grundwasserleiter erstellt werden. Das effektive Modell aus AP5 (Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen) muss hier numerisch gelöst werden.

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Das Simulationssystem UG ist weltweit über 350-mal lizenziert. Diese Nutzergemeinde ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse.

Es erfolgt eine Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, dem Institut für Numerische Simulation der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, dem Mathematischen Institut der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg und dem Institut für Geowissenschaften der Universität Jena.

Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben der beiden BMBF-Projekte vom 01.10.1994 – 31.08.1998 (FKZ 02C0254 und 02C0465) und vom 01.10.1998 – 31.12.2003 (FKZ 02E9148).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP6: Modellierung des Wärmetransports in d^3f

AP8: Modellierung freier Oberflächen und Potentialströmungen in d^3f und r^3t

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP6: Modellierung des Wärmetransports in d^3f .

Die zur Kopplung von d^3f und r^3t benötigte Übertragung des Geschwindigkeitsfeldes wurde um eine Variante erweitert, die einen exakten Übertrag der von d^3f in den Integrationspunkten berechneten Geschwindigkeit nach r^3t ermöglicht. Dadurch werden mit der bisherigen Methode gelegentlich beobachtete künstliche Quellen und Senken in r^3t vermieden. Des Weiteren ist es jetzt auch möglich, nicht-stationäre Geschwindigkeitsfelder von d^3f nach r^3t zu übertragen. Schließlich wurden nach Tests der Software durch die GRS einige Fehler beseitigt sowie einige kleinere Features (z. B. Wärmequellen und eine Ausfluss-Randbedingung für Wärme) zu d^3f hinzugefügt.

Das entwickelte Lösungsverfahren wurde erfolgreich für geklüftete Medien und für den Wärmetransport getestet. Insbesondere erfolgte eine Kopplung des entwickelten Lösungsverfahrens innerhalb eines konkreten komplexen Anwendungsproblems. Das Problem wurde von den Kooperationspartnern bei der GRS zur Verfügung gestellt. Es handelt sich um ein Modell eines Endlagers in Schweden (Äspo, Task 8b). Das Modell ist dreidimensional und umfasst eine Reihe von Klüften. Da entsprechende Anfangswerte für die Konzentration nicht vorliegen, ging es dabei zunächst nur um eine stationäre Bestimmung der Druckverteilung. Des Weiteren erfolgte die Dokumentation der erzielten Ergebnisse. Es erfolgte eine Darstellung der theoretischen Grundlagen und eine Illustration der gewonnenen Erkenntnisse anhand numerischer Tests. Hieraus ergab sich zuletzt die Formulierung eines Lösungsverfahrens, welches einem nicht-linearen Gauß-Seidel-Verfahren entspricht (engl.: iterative coupling). Dieses Verfahren ist als Alternative zum vollgekoppelten Newton-Verfahren denkbar. Erste Ergebnisse sind vielversprechend, der Ansatz muss jedoch noch weiter systematisch untersucht werden.

AP8: Modellierung freier Oberflächen und Potentialströmungen in d^3f und r^3t .

Die Implementierung der freien Grundwasseroberfläche in d^3f wurde erfolgreich abgeschlossen. Eine Modellierung der Grundwasserbildung durch Versickerung des Regenwassers wurde implementiert und getestet. Ein Beispiel mit einer analytischen Lösung wurde realisiert, in der die numerische Lösung eine Genauigkeit zweiter Ordnung zeigt. Das Beispiel enthält eine analytisch vorgegebene Strömung an der Grundwasseroberfläche durch Niederschlag. Weitere Testbeispiele stehen jetzt in d^3f zur Verfügung, z. B. auch ein einfacher drei-dimensionaler Testfall, in dem die Oberfläche sich zu einer horizontalen stationären Lage in der Zeit bewegt. Die mathematische und numerische Modellierung der freien Grundwasseroberfläche wurde ausführlich in einem Kapitel des Abschlussberichts beschrieben. Die Ergebnisse wurden mit Erfolg auf mehreren wissenschaftlichen Konferenzen vorgetragen, z. B. auf der SIAM Geoscience Tagung in Long Island, April 2011.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Auftrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Grillo, A., Lampe, M., Wittum, G. (2011): Modeling and simulation of thermohaline flow and thermodiffusion in porous media. *Journal of Porous Media*. (in press).

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10336
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d ³ f und r ³ t		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 30.09.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.340.848,00 EUR	Projektleiter: Schneider	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit der Entwicklung der Programmpakete d³f und r³t stehen Werkzeuge zur Modellierung der salzgetriebenen Dichteströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien zur Verfügung. Um die Anwendbarkeit der beiden Programmpakete auch auf die Wirtformationen Ton und Kristallin auszudehnen, ist eine Weiterentwicklung zur expliziten Berücksichtigung von Klüften und Kluftsystemen Voraussetzung. Bei der Modellierung von Einflüssen durch Klimaveränderungen kann der Wärmetransport nicht mehr vernachlässigt werden. Deshalb wird die Modellierung der Dichteströmung auf den Einfluss des Wärmetransportes ausgedehnt. Hierzu wird das Skalenverhalten von thermohalinen Strömungen in heterogenen Medien untersucht. Um Modellierungen im oberflächennahen Bereich zu ermöglichen, wird auch die Berücksichtigung von phreatischen und Potentialströmungen ermöglicht. Selbstverständlich werden auch Prä- und Postprozessoren zur Dateneingabe und zur Ergebnisdarstellung den erweiterten Anforderungen angepasst.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Freiburg (Prof. Kröner), der Uni Bonn (Prof. Rumpf) und der Uni Frankfurt (Prof. Wittum) durchgeführt. Zusätzlich ist auch das Steinbeis-Forschungszentrum (Dr. Heisig) über einen Unterauftrag eingebunden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP1: Leitung des Vorhabens

AP2: Detailplanung und Entwicklung der Benutzeroberfläche

AP3: Testrechnungen

AP4: Erstellung eines gemeinsamen Abschlussberichtes, Fortschreibung der Anwenderhandbücher und der Testfallsammlungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Am 5. und 6. Mai 2011 fand in Frankfurt das 9. Statusgespräch statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über die bereits erfolgten und noch geplanten Arbeiten. Es wurde ein Zeitplan für die Übergabe der noch ausstehenden dreidimensionalen Versionen der Programme d^3f und r^3t und der einzelnen Teile des Abschlussberichtes an die GRS vereinbart. Am 2. Februar fand ein Arbeitsgespräch beim G-CSC in Frankfurt statt, bei dem wir uns über Leistungsumfang und Funktionsweise des Präprozessors und Gittergenerators informierten.

Der Bericht „State Variables for Modelling Thermohaline Flow in Rocks“, der eine Zusammenstellung der mathematischen Ansätze für die bei der thermohalinen Strömung relevanten Zustandsgrößen enthält, wurde als GRS-Bericht 268 veröffentlicht.

Seitens des Steinbeis-Institutes wurde das Rechenprogramm d^3f für verschiedene, von der GRS formulierte 2d- und 3d-Probleme, die jeweils große Mengen an Klüften enthielten, getestet. In den 2d-Problemen bestand das poröse Medium zusätzlich aus mehreren Schichten mit unterschiedlichen hydrogeologischen Parametern. Als 3d-Testfall wurde insbesondere die Grundwasserströmung in Äspö Task 8b simuliert. In diesen Tests wurden einige Probleme bei der Darstellung der Klüfte in den Geometrie- und Gitterdateien entdeckt und in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Prof. Wittum gelöst. Das Dateiformat für die Eingabe der Randbedingungen in d^3f wurde erweitert, um die Spezifizierung der Randwerte für komplizierte Geometrien zu erleichtern. Des Weiteren wurde auch eine Möglichkeit vorgesehen, stationäre Probleme mit d^3f zu lösen.

Angeregt durch diese Testrechnungen musste das Problem der absoluten Genauigkeit der numerischen Verfahren erneut untersucht werden. Die früher dafür entworfenen Vorgehensweisen haben sich für komplizierte Kluftgeometrien und für in der Praxis interessante Randbedingungen als ineffizient erwiesen. Es wurde daher eine weitere Methode entwickelt, in der die Korrektur des Druckes durch die Lösung eines zusätzlichen Gleichungssystems berechnet wird. Mit diesem Verfahren war es möglich, in allen betrachteten Testfällen eine hohe absolute Genauigkeit zu erreichen. Ein weiteres wichtiges Problem, das sich bei den Simulationen von Äspö Task 8b zeigte, war die niedrige Effizienz des Grobgitterlösers für das sehr detaillierte grobe Gitter. Dafür wurde das in der AG Wittum implementierte AMG-Verfahren an den Fall geklüfteter poröser Medien angepasst und getestet. Dieser Löser ermöglicht, die Rechenzeit von d^3f für diese komplizierten 3d-Geometrien deutlich zu reduzieren.

Weitere Programmversionen von d^3f wurden von der GRS übernommen und anhand einfacher Beispiele mit bekannten analytischen Lösungen oder Vergleichsergebnissen anderer Modelle getestet. Darunter befanden sich Beispiele mit Klüften, Wärmetransport und freier Grundwasseroberfläche. Dadurch konnten noch mehrere kleinere Unstimmigkeiten im Modell, wie z. B. die Behandlung der thermischen Dispersion, ausgeräumt und in Zusammenarbeit mit den AGen Wittum und Kröner Fehler beseitigt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- Abschluss der Testrechnungen mit Wärmetransport und freien Oberflächen und Testen des Postprozessors
- Erstellung des Abschlussberichtes, Fortschreiben der Dokumentation und der Testfallsammlung

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kröhn, K.-P.: State Variables for Modelling Thermohaline Flow in Rocks. Bericht GRS 268, GRS Braunschweig, Dezember 2010.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10367
Vorhabensbezeichnung: Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2007 bis 31.03.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.934.900,00 EUR	Projektleiter: Reiche

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm gliedert sich in fünf Arbeitspakete:

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

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

AP2: Erarbeitung eines neuen Programmkonzepts.

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

AP3: Codeumstellung und -entwicklung.

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

AP4: Steuerung des Programmablaufs und Anbindung an externe Programme.

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

AP5: Test und Dokumentation.

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In dem zu berichtenden Zeitraum wurde im Wesentlichen an den Arbeitspaketen 3 und 5 gearbeitet.

AP3:

Das Fernfeldmodul GeoTREND-SP des Programmpakets RepoTREND (Nachfolger von EMOS) zur Berechnung des Schadstofftransports durch poröses gesättigtes Medium wurde in der ersten Version fertig gestellt. Die Arbeitsschwerpunkte in der zu berichtenden Zeitperiode waren:

- Entwicklung und Realisierung des Konzepts zur automatischen Zeitschrittsteuerung,
- Berechnung und Ausgabe einiger Kontrollgrößen und
- Optimierung der Performance.

Die Entwicklung einer ersten Version des statistischen Rahmens von RepoTREND Statist-Control zur Durchführung probabilistischer Rechnungen, bestehend aus drei Modulen:

- RunListMaker zur Erstellung eines Spielstapels,
- JsonModifier zur Modifikation der json-Inputdatei entsprechend den einem Spiel zugehörigen Parametern und
- OutCollector zum Extrahieren der für die statistische Analyse erforderlichen Daten aus den Gesamtergebnissen,

wurden abgeschlossen.

Es wurde mit der Entwicklung eines Tools zur Konvertierung der Spezifikation eines Rechenlaufs aus dem alten ASCII-Format (mehrere Dateien) in das neue json-Format begonnen.

Die Analyse der Anforderungen für die Weiterentwicklung der graphischen Bedienungsfläche XENIA, die in der nächsten Projektphase erfolgen soll, wurde abgeschlossen. Ein detailliertes Lastenheft wurde erstellt.

AP5:

Es wurden umfangreiche Tests zur Verifikation von GeoTREND-SP durchgeführt, sowohl gegenüber analytischen Lösungen als auch realen Anwendungsfällen. Die Tests waren erfolgreich. Bezüglich der nichtlinearen Sorptionskonzepte konnte nur die Basisumsetzung (Realisierung von Basisgleichungen und Initialisierung entsprechend der Rechenlaufspezifikation) getestet werden. Zur vollständigen Integration der nichtlinearen Sorptionskonzepte gehören noch das iterative Verfahren zur Berechnung von gekoppelten Schadstoffkonzentrationen und Retardationsfaktoren und die Berücksichtigung transversaler Dispersion. Die Umsetzung dieser Punkte ist für eine spätere Projektphase vorgesehen. Damit kann die vorliegende Version von GeoTREND-SP vorerst nur für Transportprozesse mit linearer Sorption eingesetzt werden.

Es wurden funktionale Tests der Module von Statist-Control und Integrationstests aller RepoTREND-Modulen erfolgreich durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Biosphären-Module (EXCON, EXMAS) sollen an das Programmpaket angebunden werden.

Des Weiteren sollen Analysen für

- Nahfeldmodul NaTREND unter der Berücksichtigung des Zwei-Phasen-Flusses und
- weitere Fernfeldmodule (CHETMAD, TRAPIC, neues Modul für kolloid-getragenen Schadstofftransport durch das geklüftet-poröses Medium)

durchgeführt und Konzepte dafür entwickelt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Über die in der ersten Projektphase abgeschlossenen Arbeiten wurde ein umfangreicher Bericht erstellt.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10377
Vorhabensbezeichnung: Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 30.06.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011
Gesamtkosten des Vorhabens: 4.681.465,00 EUR	Projektleiter: Dr. Zhang

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Dieses Ziel lässt sich untergliedern in:

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

Diese Ziele werden durch die Beteiligung am neuen ANDRA-Forschungsprogramm für das Untertage-labor Bure (ULB) in den Jahren 2007 bis 2011 und am Mine-By-Experiment im Mont Terri Rock Laboratory (MTRL) erreicht. Neben dem generellen Erkenntniszuwachs sollen die im Rahmen dieses Vorhabens erzielten Ergebnisse bei der Verbesserung von Prozessmodellen sowie bei der Weiterentwicklung des Instrumentariums für die Langzeitsicherheitsanalyse für Endlager in Tongesteinen genutzt werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Laboruntersuchungen:

- Die Quellversuche wurden durch Luftbefeuchtung einer Tonsteinprobe bei Begrenzung der Axialverformung und ohne Radialbeanspruchung weitergeführt. Dabei wurden maximale Axialquelldrücke von 8 bis 10,5 MPa und maximale Radialverformungen von 0,5 % bis 6,5 % unter 100 % Luftfeuchtigkeit gemessen.
- Ein triaxialer Kriechversuch ist bei Axialspannung von 15 MPa und unterschiedlichen Manteldrücken von 12 bis 2 MPa bislang über ein Jahr fortgeführt worden. Deutliche Kriechverformungen wurden beobachtet. 5 Axialkriechversuche sind weitergelaufen.
- Die langzeitigen Messungen der Wasserpermeabilität an 5 geschädigten Tonsteinproben sind bei unterschiedlichen THM-Beanspruchungen bislang über 3 Jahre fortgeführt worden. Dabei lässt sich eine deutliche Verheilung vom Tongestein erkennen.
- Thermische Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität vom COX-Tonstein wurden bei unterschiedlichen Wassergehalten gemessen. Die Wärmeleitfähigkeit erhöht sich mit hohen Wassergehalten.
- Weitere Kompaktionsversuche wurden an Tonversatzmaterial mit Zuschlägen von Sand, Kies und Splitt durchgeführt. Dabei wurde auch die Wasserpermeabilität in Abhängigkeit der Porosität ermittelt. Ein Kriechkompaktionsversuch ist bislang über 4 Monate bei der Belastung von 1 MPa abgelaufen und wird bei Spannungserhöhung weitergeführt.

Bohrlochverformung: Dokumentation bestätigt Trend (Zunahme der Deformation seit 09/2010 gegenüber der Vorjahresentwicklung), MP-Einbau vor/nach 2. Laststufe diskutiert.

Die Zusammenarbeit mit ANDRA ist durch mehrere Fachgespräche über die im Bure-URL laufenden TER/TED Aufheizexperimente intensiviert worden. Weiterhin ist eine Beteiligung der GRS auch am neuen ANDRA-Forschungsprogramm (2011 bis 2015) vorgesehen worden. Vor diesem Hintergrund ist die beantragte Verlängerung des Projekts mit der erweiterten Zielsetzung zur Entwicklung von Stoffmodellansätzen zur Beschreibung der Schädigung und Verheilung von Tongestein für weitere 4 Jahre bewilligt worden. Die benötigten laborativen Arbeiten werden von ANDRA mit der Bereitstellung von Kernproben unterstützt, während die numerischen Arbeiten zur Modellentwicklung und Implementierung ins Rechenprogramm CODE_BRIGHT in Zusammenarbeit mit dem Programmentwickler UPC durchgeführt werden sollen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung des Bohrlochttests zur Langzeitverformungen, Einbau MP Sonde im BL Nahbereich, Durchführung begleitender Modellierungen, Ergebnisdokumentation
- Weiterführung der Laborversuche am Tonstein
- Weiterführung der Kompaktions-/ Permeabilitätsversuche am Tonversatzmaterial
- Zwischenbericht für den Zeitraum von 05.2007 bis 12.2011
- Detailierung des Arbeitsprogramms für Modellentwicklung
- Durchführung begleitender Modellierungen zu TER/TED Experimenten

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang C.L.: Validation of constitutive models for damage and sealing of clay rock, in the 3rd CODE_BRIGHT-Workshop, UPC, June 2011

Zhang, C.L., Czaikowski O., Wiczorek, K., Rothfuchs, T.: Abstract for the International Workshop on Radioactive Waste Disposal in Beijing, 16. Oct. 2011: Thermo-Hydro-Mechanical Behaviour of Clay Rocks for Disposal of Radioactive Waste

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10417
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Komplexbildung und Sorption dreiwertiger Actinide Am(III), Pu(III) im System Actinid-NOM-natürliches Tongestein-Aquifer		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 30.06.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 345.283,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Bernhard	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist eine Erweiterung und Ergänzung der thermodynamischen und kinetischen Datenbasis im System dreiwertiges Actinid-Tongestein-NOM. Die Arbeiten gliedern sich in temperaturabhängige Komplexbildungsuntersuchungen von Am(III) (punktuell Pu(III)) mit Huminstoff-Modellliganden, Huminstoffen und Tonorganika sowie in Batchsorptionsexperimente im System Am(III)-(Konkurrenzion U(VI))-(NOM)-Tongestein/Modellton-Wasser. Aus den gewonnenen Daten soll ein vollständiger thermodynamischer Datensatz (Enthalpie, Entropiewerte) generiert werden, der Aussagen über Sensitivität der Komplexbildung/Sorption auf Temperaturveränderungen bzw. Rückschlüsse auf Bindungsverhältnisse ermöglicht. Langzeitbatchsorptionsexperimente unter endlagerrelevanten Bedingungen dienen der Charakterisierung der zeitlichen Veränderung des Sorptionsverhaltens im System Am(III)-(NOM)-Tongestein-Wasser. Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Projekten der Universitäten Mainz, Saarbrücken, München, Potsdam, Heidelberg, des Instituts für Interdisziplinäre Isotopenforschung Leipzig und des Instituts für Nukleare Entsorgung Karlsruhe.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Optimierung der Absorptionsspektroskopie mit einer Long-Path-Flow-Cell
Etablierung und Optimierung dieser Methode für den Nachweis kleinster Am(III)-Konzentrationen ($< 10^{-7}$ mol/l)
- AP2: Untersuchungen der Komplexreaktionen im System Am(III)-NOM und Am(III)-Modellligand
Bestimmung der Komplexbildungskonstanten von Am(III) mit sauerstoffhaltigen Huminstoff-Modellliganden, mit verschiedenen Huminsäuren, mit Tonorganika unter Standardbedingungen ($I = 0.1$ mol/l NaClO₄, Temperaturen von $20\text{ °C} > T > 80\text{ °C}$, pH von $2 > \text{pH} < 6$, in Anwesen- bzw. Abwesenheit von U(VI) als Konkurrenzion) und unter endlagerrelevanten Bedingungen (synthetisches Porenwasser, reduzierende Bedingungen)
- AP3: Sorptionsuntersuchungen im System Am(III)-NOM-natürliches Tongestein unter den gegebenen natürlichen Bedingungen
Durchführung temperaturabhängiger (Langzeit) Batchsorptionsversuchen im System Am(III)-(NOM)-Ton (natürliches Tongestein, Modellton)-Wasser unter Standardbedingungen ($I=0.1$ mol/l, $20\text{ °C} > T > 80\text{ °C}$, $3 > \text{pH} > 10$) und unter endlagerrelevanten Bedingungen (Porenwasser)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Die Untersuchungen zur temperaturabhängigen Komplexierung von Am(III) mit Lactat (Lac) und Eu(III) mit Salicylat (Sal) mittels TRLFS bei niedriger Ionenstärke (Am-Lac 0.1 M, Eu-Sal 1 M) und leicht saurem bis nahneutralem pH-Wert (pH = 5 - 6) wurden abgeschlossen.
Für das Am-Lac-System wurden für 3 unterschiedliche Temperaturen (25, 45 und 65 °C) Komplexbildungskonstanten für den 1:1-Komplex (AmLac^{2-}) ermittelt ($\log\beta_{11} = 2.22 \pm 0.13$ (25 °C), 2.17 ± 0.19 (45 °C), 2.35 ± 0.31 (65 °C)) und daraus die thermodynamischen Parameter ΔH und ΔS ermittelt ($\Delta H = 6.0 \pm 5 \text{ kJ mol}^{-1}$, $\Delta S = 62 \pm 20 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$). Diese Werte sind vergleichbar mit denen, die für das Eu-Lac-System ermittelt wurden (siehe Bericht 2/2010), was aufgrund der An/Ln-Analogie zu erwarten war, und sprechen für einen fast temperaturunabhängigen, nur sehr leicht endothermen Verlauf der Komplexierungsreaktion. Bei 25 °C konnte außerdem die Komplexbildungskonstante für einen 1:2-Komplex (AmLac_2^-) ermittelt werden ($\log\beta_{12} = 3.46 \pm 0.04$).
Für das Eu-Sal-System konnten im Temperaturbereich 25 – 60 °C Komplexbildungskonstanten und thermodynamische Parameter für 3 Komplexe mit unterschiedlichen Stöchiometrien, den 1:1-Komplex EuSal^{2-} , den 1:2-Komplex EuSal_2^- und den 1:3-Komplex EuSal_3 , bestimmt werden. Die Stärke des 1:1-Komplexes ist nahezu temperaturunabhängig ($\log K_1 = 1.84 \pm 0.08$ (25 °C) mit $\Delta H = -0.30 \pm 4.1 \text{ kJ mol}^{-1}$), während die Bildung der 1:2- und 1:3-Komplexe leicht endotherm verläuft ($\log K_2 = 1.72 \pm 0.20$ (25 °C) mit $\Delta H = 9.6 \pm 3.4 \text{ kJ mol}^{-1}$ und $\log K_3 = 1.33 \pm 0.14$ (25 °C) mit $\Delta H = 15.2 \pm 1.4 \text{ kJ mol}^{-1}$).
- Das Am(III)-Acetat-System wurde mittels UV-Vis temperaturabhängig charakterisiert. Die ermittelten thermodynamischen Daten für $I=0.1 \text{ M NaClO}_4$ ($\log\beta_{11}$, $_{25^\circ\text{C}} = 2.16 \pm 0.06$, $\Delta H = 11 \pm 1 \text{ kJ mol}^{-1}$, $\Delta S = 78 \pm 3 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$) sind mit entsprechenden Literaturwerten für das Eu(III)/Nd(III)-Acetat-System vergleichbar.
- Zur Charakterisierung der Eu(III)-Sorption an Opalinuston in An- und Abwesenheit von Weinsäure wurden TRLFS-Untersuchungen durchgeführt. Es konnte nachgewiesen werden, dass die Weinsäure, wie analog die Citronensäure (siehe Bericht 2/2010) nur als Komplexbildner in der Lösung eine Rolle spielt und über die Bildung von Eu-Weinsäurekomplexen die Eu-Sorption verringert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Vorarbeiten zu Untersuchungen zum Einfluss der Ionenstärke sowie der Temperatur auf die Komplexierung von Am(III) mit Pyromellitsäure (Vorarbeiten mit inaktiven Nd(III)/Eu(III), Experimente mit TRLFS, UV-Vis sowie Mikrotitrationskalorimetrie)
- Beginn der Arbeiten zum neuen Projekt (Förderkennzeichen: 02E11021)
(Voruntersuchungen mit Eu(III)/Nd(III) zur Wechselwirkung mit Borat)

5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Barkleit, S. Tsushima, O. Savchuk, J. Philipp, A. Acker, S. Taut, K. Fahmy: "Eu³⁺-Mediated Polymerization of Benzenetetracarboxylic Acid Studied by Spectroscopy, Temperature-Dependent Calorimetry, and Density Functional Theory", *Inorganic Chemistry*, erschienen in *Inorganic Chemistry* 50(12), **2011**, 5451-5459

Zuwendungsempfänger: IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Depo- nietechnik Wilsnack & Partner, Lessingstr. 46, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 10447
Vorhabensbezeichnung: Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2007 bis 31.12.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 324.108,00 EUR	Projektleiter: Dr. Wilsnack	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Entwicklung einer Versuchsmethodik und -apparatur zur Ermittlung der oberflächennahen Permeabilität von Gesteinsformationen und/oder Bauwerken.

Die Entwicklung des Verfahrens ist die Grundlage für die Ermittlung der Permeabilität an der Kontur von Gebirgsformationen. Die damit ermittelbaren Parameter bilden eine wesentliche Grundlage für die Konzipierung und Dimensionierung von hydraulischen Querschnittsab-dichtungen für untertägige Hohlräume.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Erstellung eines Lastenheftes

AP2: Entwicklung eines Konzeptes für die Versuchsausrüstung und die Versuchs-durchführung

AP3: Konstruktion, Planung und Bau der Versuchsausrüstung

AP4: Entwicklung Auswertesoftware

AP5: Test und Korrektur der Versuchsausrüstung

Aufstockung:

AP6: Entwicklung und Bau der Messausrüstung (kabelloser Sensor)

AP7: Versuchseinbau

AP8: Test Messausrüstung und Auswertung

AP9: Berichtslegung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Hardware verlorener Drucksensor:

- Entwicklung und Bau von drei Empfangsstationen und einer zentralen Empfangseinheit für die bidirektional Datenübertragung (Datenempfang/Sensorsteuerung) mit den mit unterschiedlichen Frequenzen arbeitenden Sensoren
- Bau von drei zusätzlichen Sensoreinheiten für die Testung des Messsystems und der Datenübertragung über Tage

Tests:

- erfolgreiche Tests der kabellosen Sensoren → vollständige Übertragung der gemessenen Daten und volle Funktionalität der Steuerungsoptionen für den Sensorbetrieb
- Feldstärkemessung am Standort im ERAM zur Beurteilung der Reichweite und der Sendeleistung

Fortschreiben des Berichts zum Vorhaben.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortsetzung des Projektes entsprechend Arbeitsprogramm (Abschnitt 2) mit den Arbeitspaketen 8-9.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10518
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) – TV1		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 31.03.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 886.153,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt ESTRAL (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V.) dient der Überführung von State-of-the-Art mechanistischen Sorptionsmodellen (namentlich Oberflächenkomplexierungsmodelle) in bestehende Codes zur Langzeitsicherheitsanalyse. Ziel ist es, ein Instrumentarium zu entwickeln, mit dem der Einfluss veränderter geochemischer Bedingungen auf die Radionuklidsorption besser berücksichtigt werden kann.

Da die Rechenzeiten entsprechender Codes nicht signifikant verlängert werden dürfen, wird eine indirekte Einbindung der Sorptionsmodelle über mehrdimensionale Matrizen vorausberechneter „smart K_d “ Werte angestrebt. Diese Berechnungen erfolgen auf Basis bekannter Wechselwirkungen zwischen Kontaminanten und Wirtsgestein mit Hilfe geeigneter geochemischer Speziationscodes.

Ein Schwerpunkt liegt in der Ertüchtigung des bisher durch GRS genutzten r^3t Codes durch Integration einer Abfrage vorcompilierter K_d -Werte. Dafür notwendige Eingangsgrößen (pH, Konzentration wichtiger Komponenten) sind für jeden Raum-Zeit-Punkt der Modellierung bereitzustellen. Das entwickelte Instrumentarium soll durch Strömungs- und Transportrechnungen für ausgewählte Szenarien, die zu einer zeitlichen und räumlichen Veränderung der geochemischen Bedingungen im Modellgebiet führen, erprobt werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Beschreibung des betrachteten Systems und Entwicklung der Methodik (Auswahl Elemente, Sedimente, Minerale inklusive Datenbasis, Batch-Experiment, Auswahl Einflussgrößen, Berechnung und Überprüfung der smart K_d -Werte)
- AP2: Konzeption und Implementierung in das Rechenprogramm r^3t (Modell für zeitliche und räumliche Änderungen der Einflussgrößen, Codeanpassungen für Einflussgrößen und K_d -Abruf, eindimensionale Testrechnungen)
- AP3: Anwendungsrechnungen für ausgewählte Prozesse (Strömungs- und Transportrechnungen)
- AP4: Qualitätsmanagement / Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

- Durchführung von zwei weiteren Arbeitsgesprächen mit FZD in Leipzig und Braunschweig.
- Ableitung von Protolysekonstanten für Orthoklas und Muskovit aus den Titrationsexperimenten und von Parametern für die Oberflächenkomplexmodellierung für die Sorption von Europium mit dem Programm UCODE gekoppelt mit PhreeqC. Weitergabe der Daten an HZDR zur Berechnung der K_d -Wolke.
- Anwendung der Oberflächenkomplexmodelle mit den abgeleiteten Parametern auf die Sorptionsexperimente mit Europium an einem synthetischen Sediment (80 % Qz, 10 % Or, 10 % Mu). Erfolgreiche Überprüfung des Bottom-Up Ansatzes.

AP2:

- Weitere Überprüfung und Modifikation des konzeptionellen Modells für die Variation der Einflussgrößen, deren Interaktion und Transport in r^3t .
- Überprüfung der in d^3f und r^3t neu implementierten Optionen zur Beschreibung der Klimaübergänge und Durchführung erster Testrechnungen zur Radionuklidenausbreitung mit konstantem K_d -Wert.

AP3:

- Vorbereitung und teilweise Durchführung von vergleichenden Strömungs- und Transportrechnungen für Klimaübergänge für das Deckgebirge Gorleben.

AP4:

- Dokumentation der Arbeiten zur Ermittlung der Parameter für die Oberflächenkomplexmodelle im Rahmen einer Diplomarbeit.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Ableitung von Parametern für die Oberflächenkomplexmodellierung für Cäsium und Strontium an Muskovit und Orthoklas mit dem Programm UCODE gekoppelt mit PhreeqC.
- Überprüfung des Bottom-up Ansatzes mit der vorhandenen K_d -Wolke an einem weiteren gut beschriebenen Sorptionsexperiment.

AP2:

- Abschluss der Implementierung des Konzepts zur Berücksichtigung aller geochemischen Prozesse in r^3t und Einbau des K_d -Abrufs durch das Steinbeis-Institut.
- Durchführung und Abschluss aller Testrechnungen mit dem modifizierten Rechenprogramm r^3t .

AP3:

- Durchführung von Transportrechnungen zu den Testfällen mit dem modifizierten Code r^3t . Vergleich der Rechnungen mit konstanten K_d -Werten und Smart K_d -Konzept.

AP4:

- Dokumentation aller Arbeiten für den Abschlussbericht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10528
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) – TV2		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 31.03.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 214.575,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brendler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt ESTRAL (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig) dient der Überführung von State-of-the-Art mechanistischen Sorptionsmodellen (namentlich Oberflächenkomplexierungsmodelle) in bestehende Codes zur Langzeitsicherheitsanalyse. Ziel ist es, ein Instrumentarium zu entwickeln, mit dem der Einfluss veränderter geochemischer Bedingungen auf die Radionuklidsorption direkt ermittelt werden kann.

Da die Rechenzeiten entsprechender Codes nicht signifikant verlängert werden dürfen, wird eine indirekte Einbindung der Sorptionsmodelle über mehrdimensionale Matrizen vorausberechneter „smart- K_d “ Werte angestrebt. Diese Berechnungen erfolgen auf Basis bekannter Wechselwirkungen zwischen Kontaminanten und Wirtsgestein mit Hilfe geeigneter geochemischer Speziationscodes.

Ein Schwerpunkt liegt in der Ertüchtigung des bisher durch GRS genutzten r^3t Codes durch Integration einer Abfrage vorcompilierter K_d -Werte. Dafür notwendige Eingangsgrößen (pH, Konzentration wichtiger Komponenten) sind für jeden Raum-Zeit-Punkt der Modellierung bereitzustellen. Das entwickelte Instrumentarium soll durch Strömungs- und Transportrechnungen für ausgewählte Szenarien, die zu einer zeitlichen und räumlichen Veränderung der geochemischen Bedingungen im Modellgebiet führen, erprobt werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Beschreibung des betrachteten Systems und Entwicklung der Methodik (Auswahl Elemente, Sedimente, Minerale inklusive Datenbasis, Batch-Experiment, Auswahl Einflussgrößen, Berechnung und Überprüfung der smart K_d -Werte)
- AP2: Konzeption und Implementierung in das Rechenprogramm r^3t (Modell für zeitliche und räumliche Änderungen der Einflussgrößen, Codeanpassungen für Einflussgrößen und K_d -Abruf, eindimensionale Testrechnungen)
- AP3: Anwendungsrechnungen für ausgewählte Prozesse (Strömungs- und Transportrechnungen)
- AP4: Qualitätsmanagement / Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

- Zusammenstellung der SCM-Parameter (pK_1/pK_2 , $\log K$, spez. Oberfläche) für Cs^+ , Am^{3+} , UO_2^{2+} an festgelegten Mineralphasen (Quarz, Feldspäte, Glimmer, Goethit, Gibbsite, 2- und 3-Schicht-Tonminerale) einschließlich deren Bandbreiten sowie Normierung auf unendliche Verdünnung und Bindungsdichte von $2,31 \text{ nm}^{-2}$.
- Aktualisierung der projektspezifischen thermodynamischen Datenbank ESTRAL.dat mit Komplexbildungskonstanten und deren Reaktionsgleichungen für die o.g. Mineral/Sorbent-Paare des oberen Grundwasserleiters (oGWL).
- Überarbeitung des PHREEQC-Inputfiles zur Berücksichtigung des Ionenaustausches.
- Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen (UA/SA) bezüglich der Einflussgrößen $E_1 - E_6$ mittels Kopplung der Codes SIMLAB, UCODE und PHREEQC für das Testbeispiel Cs^+ , Am^{3+} , UO_2^{2+} -Sorption an Mineralphasen des oGWL.
- Erzeugung von K_d -Matrizen mittels der obigen gekoppelten Codes für das Testbeispiel Cs^+ , Am^{3+} , UO_2^{2+} -Sorption an Mineralphasen des oGWL bei vereinfachter Parametervariation (5 Größenschritte pro Dimension E_i).

AP2:

- Aktualisierung des konzeptionellen Modells zur Variation der Einflussgrößen pH, DIC, pCO_2 , I, [Al], [Ca] in r³t.
- Erarbeitung eines Konzeptes zur Ablage und Abfrage mehrdimensionaler, äquidistanter Tabellen von smart K_d -Werten.

AP4:

- Überprüfung und Aktualisierung folgender Dokumente:
 - AP1.1 Compilation of minerals and elements
 - AP1.2 Assessing data situation
 - AP1.4 Environmental parameters
 - AP1.5 Calculation of smart K_d -values

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Komplettierung der SCM-Parameter bezüglich der Radionuklide und der Konkurrenzkationen, Übertragung in ESTRAL-Datenbank im PHREEQC-Format
- Erweiterung der UA/SA und Komplettierung der Erzeugung der K_d -Matrizen

AP2:

- Überprüfung des Modells zur Variation der chemischen Stoffgrößen im r³t-Code

AP4:

- Aktualisierung aller Arbeitsdokumente

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10538
Vorhabensbezeichnung: Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen – Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2008 bis 30.06.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 907.527,00 EUR	Projektleiter: Dr. Herbert	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen dieses Vorhabens werden experimentelle und modelltheoretische Grundlagen geschaffen, um die im Nahbereich eines HAW-Endlager zu erwartenden Wechselwirkungen von Bentonitbarrieren mit Eisenbehältern qualitativ und quantitativ beschreiben zu können. Untersucht werden in einem experimentellen Programm, die hydraulischen Veränderungen des Porenraums kompaktierter Bentonite sowie die Alteration der Bentonite selbst. Unter endlagerrelevanten Randbedingungen werden erstmalig eine Reihe voneinander abhängiger Größen in komplexen Versuchen gleichzeitig erfasst. Dazu gehören: physikalische Parameter (Quelldrücke), hydraulische Parameter (Porositäten und Permeabilitäten), mineralogische Daten (Eisenkorrosionsprodukte und die Umwandlung von Tonmineralen), chemische Parameter (Diffusionskoeffizienten) und thermische Daten (temperaturabhängige Reaktionsfortschritte). Damit werden Daten für die Modellierung gekoppelter THMC-Prozesse zur Verfügung gestellt. Die anschließenden Modellrechnungen sollen zeigen, inwieweit die gekoppelten Prozesse modellierbar sind.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Porositäts- und Permeabilitätsänderungen in hochkompaktierten Bentoniten durch Oxidation von Fe^{2+} im Porenraum bei Umgebungstemperatur.
- AP2: Änderung der Diffusionskonstanten ausgewählter Kationen und Anionen im kompaktierten Bentonit durch Ausfällung von Fe-Korrosionsprodukten im Porenraum bei Umgebungstemperatur.
- AP3: Zeitlicher Verlauf der Wechselwirkungen Eisen-Bentonit bei 25 °, 60 ° und 90 °C mit dem Ziel, die Änderung der Bentoniteigenschaften mit der realen Fe-Korrosionsgeschwindigkeit bei erhöhten Temperaturen zu korrelieren.
- AP4: Montmorillonitumwandlung mit und ohne Eisen im geschlossenen und offenen System bei Umgebungstemperatur zur Überprüfung der von Herbert et al. 2008 postulierten Abhängigkeiten von Ladung und Quelldruck.
- AP5: Modellierung des reaktiven Stofftransports und der hydro-thermo-mechanisch-chemischen Wechselwirkungen zwischen Eisen und Bentonit.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die nach dem letzten Zwischenbericht noch zu erledigenden Aufgaben wurden alle zu Ende geführt.

AP1:

Die Versuche zur Bestimmung des Quelldrucks und der Permeabilität von hochkompaktiertem MX-80 Bentonit mit 0,001 und 0,0001 mol/L FeCl_2 in Opalinustonwasser und in NaCl-Lösung wurden abgeschlossen. Es liegen nun Ergebnisse vor zu den erreichten Quelldrucken und der resultierenden Permeabilität in hochkompaktiertem MX-80 der Rohdichte $1,6 \text{ g/cm}^3$ mit NaCl-, IP21-Lösung und Opalinustonwasser mit FeCl_2 -Gehalten zwischen 10⁻¹ bis 10⁻⁴ mol/L. Die detaillierten Ergebnisse wurden im Jahresbericht 2010 dargestellt und werden im Abschlussbericht detailliert dokumentiert.

AP2:

Die Versuche zur Bestimmung der Diffusionskonstanten mit IP-21 mit elementarem Eisen wurden abgeschlossen. Damit liegen nun Ergebnisse zu Diffusionsgeschwindigkeiten von Pb, Cd und Cs in kompaktiertem MX-80 Bentonit mit den Rohdichten 1,4, 1, 6 und $1,8 \text{ g/cm}^3$ in NaCl-Lösung mit 50- und 90- % Sättigung, in IP21-Lösung mit 90 % Sättigung und in Opalinustonwasser vor. Alle gemessenen Diffusionskonstanten bewegen sich im Bereich zwischen 10^{-10} und $10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$. Unterschiedliche Salzgehalte in den Lösungen und unterschiedliche Sättigungen der NaCl-Lösung (50- % bzw. 90- %) führen nicht zu deutlichen Unterschieden in den beobachteten Diffusionskonstanten.

AP3:

Die experimentellen Arbeiten mit 100 Tagen Reaktionszeit wurden abgeschlossen und die mineralogische Untersuchung in Greifswald beendet. Die Ergebnisse aus Greifswald werden noch erwartet. Im Geolabor in Braunschweig wurden chemische Analysen der durch die Reaktion veränderten Bentonite durchgeführt. Die Auswertung ist noch im Gange, wird jedoch in Kürze abgeschlossen werden.

AP4:

Die experimentellen Arbeiten zu diesem AP in Greifswald sind abgeschlossen und ausgewertet worden. Der Anschlussbericht aus Greifswald wird in Kürze erwartet und in den Gesamtabschlussbericht des Vorhabens eingearbeitet werden.

AP5:

Die Arbeiten wurden durchgeführt. Die Ergebnisse werden im Abschlussbericht dargelegt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Alle experimentellen Arbeiten wurden abgeschlossen und ausgewertet. Der Abschlussbericht wird in Kürze vorgelegt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Ein weiterer ausführlicher Zwischenbericht der Universität Greifswald zu den Ergebnissen der mineralogischen Untersuchungen liegt vor.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10548
Vorhabensbezeichnung: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2008 bis 31.07.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.095.333,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

TA1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

- Verfolgung und Bewertung internationaler Entwicklungen zu offenen Fragen bei Langzeitsicherheitsnachweisen und Einbringung nationaler Interessen in internationale Aktivitäten.
- Weiterentwicklung methodischer Vorgehensweisen in der Langzeitsicherheitsanalyse.
- Auswertung neuer wissenschaftlicher Ergebnisse und Aufbereitung zur Verwendung in Instrumentarien für Langzeitsicherheitsanalysen.

TA2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

- Untersuchung der Auswirkungen klimatischer Veränderungen auf Prozesse in der Geosphäre und Biosphäre und Abschätzungen des Einflusses auf die Langzeitsicherheit potentieller deutscher Endlager.
- Untersuchung natürlicher Analoga: Abschließende Arbeiten am Analog-Standort Ruprechtov zur Überprüfung des konzeptionellen Modells und des Einflusses von Veränderungen der Redox-Bedingungen.
- Weiterführende Untersuchungen zur Aufsättigung von Bentonit-haltigen Buffermaterialien.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TA1:

- IGSC: Koordination und Mitarbeit bei der Erstellung eines NEA-Statusberichts über Indikatoren. Planung und Vorbereitung der nächsten Topical Session „Relevance of gases for the post-closure safety case of DGR for HLW and spent fuel“.
- Teilnahme an der jährlichen Sitzung des RWMC.

- Teilnahme am NAWG Workshop mit einem Beitrag über Analoga für Endlager im Salinar.
- Auswertung aktueller Studien und FuE-Arbeiten zu mikrobiellen Prozessen und zu deren Auswirkungen auf die Langzeitsicherheit von Endlagern in Tonformationen.
- Erstellung des GRS Berichts zum Workshop „Verfüllen und Verschließen“ mit PTKA.

TA2:

- Erstellung eines Statuspapiers mit allen neuen Ergebnissen zur Uranmineralisation am Standort Ruprechtov und Definition der noch durchzuführenden Arbeiten.
- Diskussion der Ergebnisse von Modellrechnungen zu Biosphärensystemen für veränderte klimatische Bedingungen und Modellierung von Übergängen.
- Fertigstellung des Statusberichts zur Aufsättigung von Bentonit. Weiterführung des Aufsättigungsexperiments. Prognose des Experiments anhand des bisherigen Verlaufs. Teilnahme an der Task Force on EBS Phase 2.
- Ein neuer Injektionsversuch zum SVV-Versatz im Mai 2011 zeigt kontinuierlich weiter ansteigenden Druck und eine kontinuierliche Reduzierung der Gesamtpermeabilität des Systems Salzgebirge-Auflockerungszone-SVV-Dichtelement.

4. Geplante Weiterarbeiten

TA1:

- Teilnahme an der jährlichen Sitzung der IGSC. Leitung der Topical Session.
- Abschließende Arbeiten zum NEA-Statusbericht „Indicators for the Safety Case“.
- Weiterführung der Modellrechnungen für Endlager in Tonformationen zur Überprüfung der Anwendbarkeit der von GRS Köln vorgeschlagenen Indikatoren.
- Fertigstellung eines Statusberichts zu mikrobiellen Prozessen und zu deren Auswirkungen auf die Langzeitsicherheit von Endlagern in Tonformationen.

TA2:

- Weiterführung und Abschluss der Modellrechnungen des HMGU zur Berücksichtigung von Klimaübergängen in Biosphärenmodellen.
- Durchführung von transienten Strömungs- und Transportrechnungen für Klimazyklen über Zeiträume von einigen 100.000 Jahren für ein Deckgebirge eines Endlagers im Salinar.
- Grundwasserprobenahme am Standort Ruprechtov und weitere Analyse der durch den Kaolinabbau freigelegten, Uran-führenden Horizonte .
- Weiterführung der Aufsättigungsexperimente. Prognoserechnungen zum Aufsättigungsexperiment mit VIPER. Teilnahme an der Task Force on EBS Phase 2.
- Weiterführung der Nachuntersuchungen zum selbstheilenden Versatz (SVV) am Standort Teutschenthal.

5. Berichte, Veröffentlichungen

T. Rothfuchs (ed.): Verschlussysteme in Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle in Salzformationen. Workshop der GRS in Zusammenarbeit mit dem Projektträger Karlsruhe PTKA-WTE. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-267, Braunschweig, Januar 2011.

Kröhn, K.-P.: Code VIPER Theory and Current Status. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-269, Braunschweig, März 2011.

H.-J. Herbert: Verschlussbauwerke aus selbstverheilendem Salzversatz – Kali und Steinsalz, Heft 1/2011, 42- 50.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10558
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP1 - Kurztitel A-DuR -		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 30.09.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.074.250,00 EUR	Projektleiter: Schneider	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen d^3f und r^3t stehen Werkzeuge zur Modellierung der Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien mit expliziter Berücksichtigung von Klüften und Kluftsystemen zur Verfügung.

Die beiden Rechenprogramme sollen aber nicht nur für poröse Medien mit expliziten Klüften sondern auch für dichte geklüftet-poröse Gesteine großer geologischer Formationen Anwendung finden. Dies geschieht in integrierten sicherheitsanalytischen Modellen nur sehr vereinfacht. Der Schadstofftransport wird derzeit nur als Diffusionsprozess abgebildet. Da die bei allen potenziellen Wirtsgesteinen auftretenden Inhomogenitäten und Klüfte auf unterschiedlichen Skalenebenen auftreten, müssen Mehrskalensätze berücksichtigt werden. Diese berücksichtigen lokale Effekte bzw. steile Druck- bzw. Konzentrationsgradienten in hoher Auflösung, während für die großräumige Modellierung anderer Bereiche Mittelwerte benutzt werden. Auch die Präprozessoren zur Dateneingabe werden den erweiterten Anforderungen angepasst.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Uni Jena (Prof. Attinger), dem Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung-UFZ (Prof. Kolditz) und der Uni Frankfurt (Prof. Wittum) durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Auswahl von Datensätzen
- AP6: Geostatistische Methoden, stochastische und fraktale Modellierung
- AP9: Testrechnungen
- AP10: Entwicklung und Realisierung der Benutzeroberfläche
- AP11: Koordinierung des Vorhabens

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Am 6. Mai 2011 fand in Frankfurt das 4. Statusgespräch statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über die bereits erfolgten und die für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten.

Die Beschreibung des Testfalls Äspö Task 6c der Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes (TF GWFTS) von SKB wurde um die Daten für die synthetischen Klüfte und die statistischen Daten für die Hintergrundklüfte ergänzt. Der Beginn der Modellierung verzögerte sich durch Probleme im Gittergenerator ProMesh3 aufgrund einer bis dahin nicht berücksichtigten Konstellation im Kluftsystem (Durchstoßen einer Kluftkante durch eine andere Kluft).

Für die aktuell laufende Task 8c der TF GWFTS ist ein Modell mit wenigen deterministischen Klüften sowie mit statistisch verteilten Hintergrundklüften erforderlich. Die Möglichkeit einer Mitarbeit in der TF im Rahmen von A-Dur wurde unter den Projektpartnern diskutiert.

Als ein zweidimensionaler Testfall für die Abbildung von Inhomogenitäten in geklüfteten Gebieten wurde der Standort Jenissei ausgewählt. Das Deckgebirge besteht aus geklüftetem Gneis, der von Dykes durchsetzt ist. Die Kontaktbereiche zwischen Dykes und Gneiss können, wie auch die Klüfte, explizit als niederdimensionale Objekte in das Strömungsmodell integriert werden. Erste Rechnungen mit 27 Kontaktzonen zu den Dykes und 18 Klüften wurden durchgeführt mit dem Ziel, später Vergleichsrechnungen mit effektiven Parametern durchzuführen.

Die Ergebnisse der NAGRA aus dem EFP-Projekt müssen noch aufbereitet werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- Mit den Rechnungen der ersten Version des Testfalls Task 6c wird begonnen.
- Ein Modell zu Task 8c mit einem homogenen Ersatzsystem für die Hintergrundklüfte soll erstellt werden.
- Mit der Modellierung des eines 2d-Testfalls und des einfacheren 3d-Testfalls von der NAGRA wird begonnen.

Das nächste Statusgespräch wird am 21. November 2011 stattfinden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt		Förderkennzeichen: 02 E 10568
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP2 - Kurztitel A-DuR -		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 30.09.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 548.396,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Wittum	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Projektes ist es, die Entwicklung eines numerischen Löser für das mesoskalige Referenzmodell (AP3), die Implementierung eines adaptiven numerischen Mehrskalenlösers für das Gesamtsystem und die Implementierung in d^3f und r^3t (AP5) sowie Algorithmen und Softwarewerkzeuge zur inversen Modellierung und Schätzung der relevanten Parameter des Strömungsproblems (AP7) einzubringen. Gemeinsam mit den Projektpartnern werden Benchmarking-Tests sowie Vergleichsrechnungen (AP9) durchgeführt.

Es sollen Diskretisierungsverfahren höherer Ordnung für die gemischt parabolisch-hyperbolischen Probleme entwickelt und in die Simulationssoftware umgesetzt werden. Dies soll auf der Basis von un stetigen Galerkin-Verfahren bzw. Finite-Volumen-Verfahren erfolgen. Für die so entstehenden Systeme sollen schnelle Lösungsverfahren auf der Basis von Mehrgittermethoden entwickelt werden. Entscheidend ist ferner die effiziente Umsetzung der Methoden auf massiv parallelen Rechnern. Basis der Implementierung werden die Software-Werkzeuge d^3f und r^3t sein.

Zur Schätzung von Parametern für diese Systeme werden effiziente numerische Verfahren entwickelt und programmtechnisch umgesetzt. Die Verfahren werden auf den Gauß-Newton-Techniken aufbauen, die mit Mehrgittermethoden kombiniert werden. Auch hier ist die effiziente Umsetzung auf Parallelrechnern entscheidend, da die Komplexität der inversen Probleme die der Simulation selbst leicht um eine Größenordnung übersteigen kann.

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Das Simulationssystem UG ist weltweit über 350-mal lizenziert. Diese Nutzergemeinde ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse.

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

Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben der beiden BMBF-Projekte vom 01.10.1994 – 31.08.1998 (FKZ 02 C 0254 6 und 02 C 0465 0) und vom 01.10.1998 – 31.12.2003 (FKZ 02 E 9148 2).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP3: Entwicklung eines numerischen Löser für das mesoskalige Referenzmodell
- AP5: Adaptiver numerischer Mehrskalnlöser für das Gesamtsystem und Implementierung in d^3f und r^3t
- AP7: Algorithmen und Softwarewerkzeuge zur inversen Modellierung und Schätzung der relevanten Parameter des Strömungsproblems
- AP9: Benchmarking und Vergleichsrechnungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP3: Entwicklung eines numerischen Löser für das mesoskalige Referenzmodell
- AP5: Adaptiver numerischer Mehrskalnlöser für das Gesamtsystem und Implementierung in d^3f und r^3t

Neben den Arbeiten an der Implementierung des 3-dimensionalen Falls (noch nicht abgeschlossen) wurde an Feinheiten in Hinblick auf den 2-dimensionalen Fall gearbeitet. Dabei wurden Testbeispiele mit Kluftnetzwerken bei konstanter Kluftdicke gerechnet. Die vorhandene Implementierung hat sich dafür als geeignet erwiesen, nachdem einige bisher nicht beachtete Unstimmigkeiten behoben wurden. Auch zeigte sich bei diesen Tests, dass das Erstellen der dafür benötigten Geometrien mit den in ProMesh implementierten Algorithmen einfach und effizient ist.

Um die nötige Gitter-Adaptivität in der Umgebung von Klüften und wichtigen Strukturen zu ermöglichen, haben wir uns wegen der großen Flexibilität und der Vorteile beim Parallelisieren für den zukünftigen Einsatz von Verfeinerungstechniken mit hängenden Knoten entschieden. Der Dimensionsübergang erfordert dabei einen anspruchsvollen Mix aus anisotroper Verfeinerung für niederdimensionale Klüfte und voller Verfeinerung bei volldimensionalen Klüften. Dazu wurden neue anisotrope Verfeinerungstechniken für 2- und 3-dimensionale gemischte hierarchische Gitter mit hängenden Knoten eingeführt.

Um die immensen Rechenanforderungen für große Anwendungsfälle in annehmbarer Zeit abarbeiten zu können, haben wir weiter an der Parallelisierung der genutzten Löser sowie an Algorithmen zur flexiblen Verteilung der Rechengebiete gearbeitet. Hierbei konnten wir in ersten Tests mit einfachen 2-dimensionalen Beispielp Problemen bereits sehr gute Skalierbarkeit des geometrischen Mehrgitterlösers für große Prozessorzahlen beobachten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Grillo, M. Lampe, D. Logashenko, S. Stichel, G. Wittum: "Simulation of salinity- and thermo-haline-driven flow in fractured porous media" (submitted)

S. Stichel, D. Logashenko, A. Grillo, S. Reiter, M. Lampe, G. Wittum: "Numerical methods for flow in fractured porous media" (submitted)

Zuwendungsempfänger: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 10578
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP3 - Kurztitel A-DuR -		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 30.09.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 290.377,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Attinger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundvorhabens ist die grundlegende Erweiterung der numerischen Modelle d^3f und r^3t auf heterogen-porösen und klüftig-porösen Medien (adaptives numerisches Mehrskalmodell). Bisher simulierten d^3f und r^3t nur die Strömungs- und Transportmodellierung von Sedimentgesteinen und einzelnen Klüften.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Frankfurt (Prof. Wittum), dem UFZ Leipzig (Prof. Kolditz) und der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP2: Herleitung eines mesoskaligen Referenzmodells zur Kompartimentierung des Rechengebiets und Modellierung der Prozesse in den einzelnen Kompartimenten

- Erzeugung der subskaligen Heterogenitäten
- Modellierung von Strömung und Transport auf der feinen Modellskala
- Skalierung (Filtermethode)

AP4: Konzepte und Kriterien für die Mehrskaladaptivität

AP6: Niederdimensionale Modellierung von Heterogenitäten und Klüften

- Entwicklung eines schnellen eindimensionalen Modells zur Durchführung von Szenarien-untersuchungen
- Geostatistische Methoden
- stochastische und fraktale Modellierung von Channeling

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Erzeugung der subskaligen Heterogenitäten:

Als Ergebnis einer umfangreichen Literaturrecherche wurde beschlossen, diese mittels stochastischer Felder zu realisieren. Zur Beschreibung dieser Zufallsfelder wurden die Arbeiten von DiFederico und Neuman verwendet, in welchen das Variogram von multiskaligen Zu-

fallsfeldern mit endlicher oberer Längenskala beschreiben. Diese Darstellung ist sehr gut für eine hybride Repräsentation geklüfteter Medien geeignet.

Im Anschluss wurde mit der Implementierung eines Generators für solche Zufallsfelder begonnen. Dabei zeigte sich schnell, dass einfache Methoden basierend auf der Fourier Methode nicht in der Lage sein werden, Multiskalen-Zufallsfelder mit genügender Qualität zu erzeugen. Deshalb wurden zwei Alternativen in Betracht gezogen:

- die so genannte Randomization-Methode (eine Erweiterung der Fourier-Methode)
- die Fourier-Wavelet-Methode, die das Zufallsfeld konsequent mittels eines hierarchischen Multiskalen-Ansatzes aufbaut.

Erste Ergebnisse für Zufallsfelder in einer Dimension zeigen tatsächlich eine sehr gute Reproduktion des Variograms über mehrere Dekaden für die Fourier-Wavelet Methode.

Skalierung (Filtermethode):

Die Herleitung der Ausdrücke für die Dispersionskoeffizienten für Medien ohne Skalenseparation (unendlichen Korrelationslänge der Heterogenitäten) wurde abgeschlossen:

- longitudinale Komponente: Die Makrodispersion ($D_{ensemble}$) und die effektive Dispersion ($D_{effektiv}$) unterscheiden sich für alle Zeitskalen (nicht-ergodisch).
- transversale Komponente: Die Divergenzfreiheit greift (wie auch im Falle einer endlichen Korrelationslänge), aber auf einer sehr viel größeren Zeitskala.

Wegen der angewandten Skalierungsmethode kommt es bei der Makrodispersion zu einem künstlichen Mischungseffekt, der die reale Dispersion überschätzt. Deswegen benutzen wir die Filtermethode Coarse Graining (CG), die flexibler ist bei der Anwendung auf eine beliebige Skala. Dabei wurden bislang folgende Erkenntnisse erzielt:

- Bei endlichen Korrelationslängen zeigte sich bei beiden Dispersionskomponenten schon bei einer sehr geringen Filtergröße P ($P < 10$) ein sichtbarer cutoff-Effekt.
- Der oben erwähnte künstliche Mischungseffekt tritt auch beim CG auf. Um die damit einhergehende Überschätzung zu vermeiden, sollte die Filtergröße P entsprechend der realen (physikalischen) Mischung gewählt werden.
- Bei unendlichen Korrelationslängen wird ein cutoff-Effekt erst für vergleichsweise große Filtergrößen ($P > 100$) sichtbar (keine endliche Korrelationslänge).

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss des AP2: Dazu müssen die Ergebnisse bezüglich der Qualität der erzeugten Zufallsfelder ausgebaut und systematisch mit den oben genannten 3 Methoden verglichen werden. Im Anschluss muss eine Erweiterung auf 2 und 3 Dimensionen stattfinden.

Außerdem werden die Untersuchungen zur Filtermethode Coarse Graining für Medien ohne Skalenseparation weitergeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Ein Vortrag beim A-DuR Projektreffen in Frankfurt am 6. Mai 2011.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 10588
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP4 - Kurztitel A-DuR -		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 30.09.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 209.743,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Kolditz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundvorhabens ist die Weiterentwicklung von Berechnungsmethoden für reaktive Transportprozesse in heterogenen porösen und klüftig-porösen Medien.

Gegenstand des Teilprojekts AP8 beschäftigt ist die Unsicherheitsanalyse. Dabei geht es um eine Quantifizierung der Unsicherheiten, d. h. Vorhersagegenauigkeit von Modellprognosen.

Im Rahmen des Teilprojekts AP9 wird eine systematische Sammlung von Testbeispielen für Kluffgesteine entwickelt, um Genauigkeit und Stabilität der numerischen Modelle zu prüfen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Jede Prozesssimulation in Kluffgesteinen ist a priori mit Unsicherheiten behaftet. Daher ist es vor allem für sicherheitsrelevante Fragestellungen, wie die Endlagerung, von großer Bedeutung, Modellfehler abschätzen zu können. Ursachen für Unsicherheiten können unterschiedlicher Natur sein: keine genaue Kenntnis der strukturgeologischen Bedingungen (Kluffsysteme, Heterogenitäten) aufgrund geringer Erkundungsdaten, Parametrisierungs- und Skalenprobleme. Für die Unsicherheitsanalyse sollen Methoden für Kluffgesteine entwickelt werden. Im AP8 sollen daher neben numerischen Lösern auch sog. Random-Walk/Particle-Tracking (RW/PT) Verfahren weiterentwickelt und angewendet werden. Für die Bewertung der Genauigkeit und der Zuverlässigkeit numerischer Modelle ist die Entwicklung von systematischen Benchmark-Tests im AP9 von großer Wichtigkeit (Kolditz et al. 2011). Dabei ist folgende Systematik von Testaspekten vorgesehen.

Dabei ist folgende Systematik von Testaspekten vorgesehen.

- Kluff-Matrix Systeme: Kluff-Matrix Interaktion, Kluffsysteme (z. B. Grimsel-Scherzone),
- Kopplung von Prozessen (systematisch zunehmende Komplexität): Hydraulik, insbesondere für Kluffrauigkeiten (stark heterogene Klufföffnungs- und Permeabilitätsverteilungen, Konservativer Transport, Transport mit Zerfallsprozesse, Transport mit Sorptionsprozessen, Matrix-Diffusion, Matrix-Diffusion mit Zerfalls- und Sorptionsprozessen in der Matrix.
- Methoden-Vergleiche: Verschiedene numerische Verfahren (FVM, (X)FEM, MFEM, hybride Methoden), Numerische (PDE-basierte) und Partikel-Methoden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Schwerpunkt in dieser Projektphase lag auf der Untersuchung von Transportprozessen in realen Kluffsystemen. Dazu wurde ein erster Datensatz aus dem Felslabor Grimsel verwendet. Darüber hinaus wurden numerische Methoden speziell für Kluffnetzwerk-Matrix-Systeme (RWPT, extended

(Watanabe et al. 2011) und mixed finite elements) weiterentwickelt. Folgende spezielle Arbeiten wurden in der Berichtsperiode durchgeführt:

AP8: Unsicherheitsanalyse

- Die Particle-Tracking (PT) Methode wurde für 3D Problemstellungen erweitert und anhand von analytischen Lösungen verifiziert (Sun et al. 2011).
- Codevergleiche zwischen OpenGeoSys (FEM) und TOUGH (FVM) wurden angestellt, um die numerische Genauigkeit (Mittlungseigenschaften) verschiedener Verfahren zu evaluieren. Dabei wurden die Berechnungsergebnisse von Geschwindigkeitsfeldern in rauen Klüften unter verschiedenen mechanischen Beanspruchungen verglichen.
- Eine gemischte Finite-Elemente-Methode (MFEM) für nichtlineare Strömungen wurde in OGS implementiert.

AP9: Testbeispiele, Entwicklung der Benchmark-Systematik

- Transportprozesse in Einzelklüften: Dispersion, Sorption, Zerfall, Matrixdiffusion mit unterschiedlichen Kluftauigkeiten wurden untersucht. Dabei wurden geostatistische Eigenschaften anhand von existierenden Datensätzen verwendet.
- Transportprozesse in realen Kluftnetzwerken: Auf der Grundlage der in der letzten Projektphase entwickelten Vernetzungstools könnte Transportmodelle in Kluftnetzwerken mit hoher Genauigkeit simuliert werden. Als Beispiel diente der Grimsel-Datensatz eines realen Kluftsystems im Kristallin. Der Einfluss der räumlichen Diskretisierung auf die Genauigkeit der numerischen Ergebnisse wurde untersucht.
- Matrixdiffusion in realen Kluftsystemen: Die Qualität der generierten Rechengitter war ausreichend, um Matrixdiffusionsprozesse im Grimsel-Kluftnetzwerk zu berechnen.
- Zu den Ergebnissen in dieser Berichtsperiode wurde der laufende Fortschrittsbericht aktualisiert (Taron et al. 2011).

Zu den wissenschaftlichen Ergebnissen in dieser Berichtsperiode wurde der laufende Fortschrittsbericht aktualisiert (Taron et al. 2011). Die Ergebnisse des A-DuR Vorhabens wurden auf der SIAM Geosciences 2011 in den USA präsentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Projektphase stehen folgende Arbeiten im Vordergrund:

- Reale Kluftnetzwerkmodelle: Mit dem entwickelten numerischen Modell (verschiedene Diskretisierungen mit und ohne Gesteinsmatrix) für das Grimsel-Kluftsystem steht ein wichtiges Testbeispiel für Code-Vergleiche mit r3t zur Verfügung und soll für die Modellanwendungen im A-DuR Vorhaben intensiv genutzt werden.
- Methodenentwicklung: Numerische Methoden für die Kluftnetzwerkmodellierung, insbesondere 3D RWPT, XFEM werden weiter verfolgt. Weitere Benchmarks für die Verifizierung numerischer Modelle sind in Vorbereitung (Kolditz et al. 2011).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kolditz O, Shao H, Görke U-J, Wang W (eds.) (2011): Benchmarking Porous Media: Modeling Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical (THMC) Processes. LNCSE-Series, Springer, Berlin-Heidelberg, 400pp, forthcoming.

Taron J, Watanabe N, Sun YY, Park C-H, Radu FA, Kolditz O (2011): 4th A-DuR Project Progress Report. Technical Report, UFZ, Environmental Informatics.

Sun YY, Park C-H, Wang W, Kolditz O (2011): Simulation of solute transport in porous media using random walk particle tracking method. PARTICLES 2011, ECCOMAS / ICAM Thematic Conference, Barcelona, 26-28.10.2011.

Watanabe N, Wang W, Taron J, Gorke U-J, Kolditz O (2011): Lower-dimensional interface elements using local enrichments and application for a coupled hydromechanical problem in fractured rock. Int Journal for Numerical Methods in Engineering, under revision.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10608
Vorhabensbezeichnung: Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2008 bis 31.12.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.324.900,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hagemann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

- Erstellung eines thermodynamischen Modells für Sulfidspezies
- Ermittlung thermodynamischer Daten für wichtige Hintergrundsalze
- Entwicklung einer Programmgruppe zur Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse für geochemische Modellierungen

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Untersuchung der Löslichkeit und Bestimmung der Aktivitätskoeffizienten von H_2S und Hydrogensulfid in salinaren Lösungen bei 15 - 40 °C. Untersuchung der thermodynamischen Stabilität ausgewählter Schwermetallsulfide und –sulfidokomplexe.
- Kritische Literaturlauswertung zu kolligativen Eigenschaften von Hintergrundsalsen (Nitrate und Perchlorate von Kalium, Natrium und Lithium) und ihrer Wechselwirkungen mit anorganischen Komplexbildnern Hydroxid, Chlorid und Carbonat bei 25 - 90 °C. Ergänzende Wasserdampfdruckmessungen sowie Löslichkeitsmessungen.
- Entwicklung von Werkzeugen zur Durchführung geochemischer Modellrechnungen und Unsicherheitsanalysen in einem Schritt durchzuführen. Hierzu werden drei Programm-Module entwickelt, die die Planung, Durchführung und Auswertung von statistisch begleiteten Rechnungen ermöglichen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Bestimmung der Löslichkeit von H_2S in salinaren Lösungen wurde weitergeführt. Die bereits durchgeführten Messungen mit KCl -haltiger Salzlösung wurden für 15 °C und 40 °C ergänzt. Messungen mit MgCl_2 -haltigen Lösungen wurden bei 40 °C durchgeführt. Neu dazu kamen Messreihen für die Salze CaCl_2 , Na_2SO_4 und K_2SO_4 . Die eingesetzten Salzkonzentrationen dieser Lösungen variierten im Verlauf der Versuche für CaCl_2 von 4,7-0,53 mol/kg, für Na_2SO_4 von 2,0-0,68 mol/kg und für K_2SO_4 von 0,65-0,25 mol/kg. Nach Einstellung der jeweiligen Gas/Lösungsgleichgewichte wurde die Druckdifferenz zu einem vorab definierten Referenzwert (Startbedingungen) gemessen. Aus diesen experimentell bestimmten Daten

konnten die Sättigungskonzentrationen von H_2S und der Aktivitätskoeffizient für die angegebenen Salze und der jeweiligen Konzentration berechnet werden.

Die Literaturlauswertung zum Thema thermodynamische Stabilität ausgewählter Schwermetallsulfide und –sulfidokomplexe wurde weitergeführt. Besondere Beachtung fanden dabei die Elemente Fe, Ni, Cd, Zn und Hg, sowie die ausgewählten Lanthaniden Ce, Nd und Eu.

Es wurde eine neue Apparatur zur Messung der Dampfdrücke von Salzlösungen entwickelt und aufgebaut. Die besteht aus einem thermostatisierbaren Glasreaktor mit Anschlüssen für Schutzgas, Vakuumpumpe, Lösungszufuhr, kontinuierlich messenden Hochpräzisions-Druck- und Temperaturaufnehmern sowie beigestelltem Magnetprüher. Die gesamte Apparatur wird in einem Thermostatschrank betrieben, um Temperaturunterschiede zwischen einzelnen Komponenten, besonders aber zwischen den untersuchten Medien (Lösungs-, und Gasphase) einerseits und den Messgeräten andererseits weitgehend auszuschließen. Derzeit laufen Testmessungen zur Prüfung der Dichtigkeit der Apparatur und zum Ansprechverhalten der Messgeräte.

Die im Rahmen des Vorhabens vorgesehenen isopiastischen Versuche konnten weitgehend abgeschlossen werden. Die Systeme $\text{LiCl-LiClO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{KNO}_3\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{KCl-KNO}_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{KNO}_3\text{-KOH-H}_2\text{O}$, $\text{LiClO}_4\text{-LiOH-H}_2\text{O}$, $\text{NaCl-NaNO}_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{NaCl-NaClO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{NaClO}_4\text{-NaOH-H}_2\text{O}$, $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-H}_2\text{O}$ zeigen bei 40, 60 und 90 °C ein Zdanovskij-Verhalten, also gerade Isoaktivitätslinien. Gemischte ternäre Lösungen lassen sich also als ideale Mischungen der einfachen binären Lösungen beschreiben.

Es wurde mit der Entwicklung von Werkzeugen zur Unsicherheitsanalyse geochemischer Rechnungen begonnen. Als erstes Produkt entstand hierbei eine auf dem GRS-Programm EQBlitz beruhende Oberfläche, mit der sich grundlegende geochemische Modellierungen unter Berücksichtigung von Unsicherheiten für wichtige Eingangsfaktoren planen lassen. Hierzu gehören, Konzentration von Komponenten in der Ausgangslösung, Massen von Reaktanden aber auch thermodynamische Parameter. Das Programm erlaubt die Auswahl aus verschiedenen Verteilungsfunktionen und erzeugt nach Maßgabe des Nutzers eine beliebige Zahl gewürfelter Faktorwerte, die im nächsten Schritt für die geochemische Modellierung verwendet werden können.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Durchführung von Messungen der Löslichkeit von H_2S in MgSO_4 -haltigen Salzlösungen bei 15, 25 und 40 °C.
- Durchführung von Messungen der Löslichkeit von H_2S in einfachen Mischsystemen ($\text{NaCl-KCl-H}_2\text{O}$; $\text{NaCl-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$) bei 15, 25 und 40 °C.
- Konstruktion einer Messapparatur, die die Bestimmung von Hydrogensulfid-Aktivitäten in ozeanischen Salzlösungen ermöglicht. Ggf. Erprobung einer anderen Messmethode.
- Messungen des Dampfdrucks über relevante Hintergrundsalzlösungen.
- Weiterentwicklung des Werkzeugs zur Planung und Durchführung von Unsicherheitsanalysen von geochemischen Modellierungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10618
Vorhabensbezeichnung: Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2009 bis 31.08.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 628.694,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Bernhard	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Projektes ist es, Kenntnisse zur mikrobiellen Diversität im natürlichen Tongestein durch direkte molekular-biologische Methoden zu erhalten und den Einfluss identifizierter dominierender Bakterienpopulationen, nach Kultivierung entsprechender Isolate, auf das geo-chemische Verhalten der Actiniden (Uran, Plutonium, Curium) in diesem Tongestein zu untersuchen. Die Wechselwirkungsprozesse der ausgewählten Actinide mit Äspö-relevanten Biofilmen sollen aufgeklärt werden. Es werden Aussagen erstens zur Biodiversität, den dominierenden bakteriellen Populationen, und zweitens zu deren Wechselwirkungsprozessen mit den ausgewählten Actiniden erwartet. Innerhalb dieses Vorhabens soll das vorhandene biologische Know-how mit dem geo-chemischen Know-how zusammengeführt werden, um es effektiv hinsichtlich der Endlagerforschung zu nutzen. Teilziel 1 des Vorhabens ist die direkte Untersuchung mikrobieller Diversität in Opalinus-Ton- und Porenwasserproben. Teilziel 2 ist die Kultivierung Opalinus-Ton spezifischer Bakterien. Teilziel 3 umfasst die Charakterisierung der Wechselwirkungen ausgewählter Bakterien-Tonisolat mit Actiniden. Teilziel 4 beschäftigt sich mit der Untersuchung zu Wechselwirkungen von Biofilmen Äspö-relevanter Bakterien mit ausgewählten Actiniden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Direkte Untersuchung mikrobieller Diversität in Opalinus-Ton- und Porenwasserproben
 AP2: Kultivierung Opalinus-Ton spezifischer Bakterien
 AP3: Untersuchung der Wechselwirkungen der Ton spezifischen Bakterien mit ausgewählten Actiniden
 AP4: Untersuchung der Wechselwirkungen von Biofilmen Äspö-relevanter Bakterien mit Actiniden

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Literaturrecherche (Actinide + Ton-relevante Mikroorganismen; Biodiversität)
- Auswertung der 16S rRNA Gen Klonbibliotheken: a) Opalinus Ton von der Oberfläche (MT-2-SF): Identifizierung von Kontaminanten z. B. durch das Bohren des Kerns, b) Opalinus Ton behandelt mit 1×10^{-6} M U(VI) in 0.1 M NaClO₄ (MT-2+U)
- Planung/Durchführung von Anreicherungsexperimenten (R2A-, Sulphat-Reduzierer- und Nitrit-Reduzierer-Medium) zur Isolierung Opalinus-Ton spezifischer Bakterien aus Porenwasser
- Untersuchungen des Äspö-Bakteriums *P. fluorescens* mit U(VI) mittels potentiometrischer Titrationen
- Fortsetzung Untersuchungen an *P. fluorescens*-Biofilmen (steril und aerob); Generierung unter verschiedenen Bedingungen (Nährmedien mit PO₄³⁻ = 25 g/L und < 15 mg/L); Einsatz von Mikrosensoren
- Untersuchungen zur Wechselwirkung des Ton-Isolates *Sporomusa* sp. mit Cm(III)
- Erste Untersuchungen zur Wechselwirkung des Ton-Isolates *Paenibacillus* sp. mit U(VI); Reinheitskontrolle mittels *in situ* PCR und RFLP durchgeführt und optimiert; Optimierung anaerobe Kultivierung
- Probenpräparation zur Strukturcharakterisierung des mikrobiell gebunden U(VI) (*P. fluorescens*, *Sporomusa* sp., *Paenibacillus* sp. und *P. fluorescens*-Biofilm) für den ersten Run bei ROBL (22.06.-28.06.2011)

Ergebnisse AP1 & AP2:

Probe MT-2-SF wird von Vertretern der *Betaproteobacteria* (*Ralstonia* sp., *Burkholderia* sp.) (100 %) dominiert (Unterschied zum Kern MT-2); Anreicherungsexperimente (R2A-, Sulphat-Reduzierer- und Nitrit-Reduzierer-Medium) zur Isolierung Opalinus-Ton spezifischer Bakterien aus Porenwasser wurden durchgeführt. Die Identifizierung der isolierten Opalinus-Ton spezifischen Bakterien wird derzeit vorgenommen

Ergebnisse AP3 & AP4:

U(VI) und *P. fluorescens* (planktonische Zellen): TRLFS metabolisch aktiver Zellen mit U: a) im SSM mit reduziertem PO_4^{3-} -Gehalt: stark rotverschobenes U(VI)-TRLFS-Spektrum (Phosphat-haltige Mineralphasen); b) im red. SSM ohne Phosphat: Spektrum ähnlich dem des U(VI)-Succinat-Komplexes (Unterschied); Mittels potentiometrischer Titration konnten die globalen pKs-Werte und Surface Site Densities in mmol/g von *P. fluorescens* bestimmt und U-Spezies identifiziert werden.

U(VI) und *Paenibacillus* sp. – erste Ergebnisse: *Paenibacillus* sp. wächst 4x schneller und zu höheren ODs mit Hilfe von Tonextraktzusatz als im normalen R2A-Medium. Akkumulierte U(VI)-Gehalte der anaeroben EXAFS-Proben: inaktive Zellen (in 0.1 M NaClO_4) mit [BTM] = 0.2 g/L und 0.1 mM U(VI) bei pH 4 55 mg/g und 129 mg/g bei pH 7.

U(VI) und *Sporomusa* sp. – erste Ergebnisse: Untersuchungen zur Wechselwirkung des Opalinus-Ton spezifischen Bakteriums *Sporomusa* sp. mit U(VI). XAS Proben wurden vorbereitet und gemessen. Erste Auswertungen geben Hinweise auf eine Reduktion von U(VI) zu U(IV). Weitere Untersuchungen werden durchgeführt.

Cm(III) und *Sporomusa* sp.: intensive WW schon bei geringen Zellkonzentrationen (≥ 0.0001 g/L); 70 % des Cm(III) werden mit 0.01 M EDTA wieder abgelöst (Biosorption); irreversibel gebundenes Cm(III); 2 Cm(III)-Spezies mit TRLFS charakterisiert; Anregungsspektren: kontinuierliche Rotverschiebung der Hauptbande (F) im Vergleich zum Cm^{3+} (aq.); Unterschiede zum Cm(III)-*P. fluorescens* System.

U(VI) und steril kultivierter *P. fluorescens* Biofilm: Biofilm reagiert durch Zugabe von U mit Stressreaktionen: Erhöhung des PO_4^{3-} -Gehaltes durch Phosphatase sowie erhöhte Stoffwechselaktivität: starke Reduzierung des O_2 -Gehaltes im Biofilm; Abnahme Redoxpotential (auf ~280 mV) und pH im Biofilm (8.03 zu 7.55); Entstehung „Mikroenvironment“ (Immobilisierung von U möglich); 6.9 mg U pro 1g Biofilm-Trockenmasse werden gebunden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung der direkten Diversitätsuntersuchungen
- Fortsetzung der Arbeiten zur Isolierung weiterer Opalinus-Ton spezifischer Bakterien durch Anwendung geeigneter Medien und Identifizierung der gewonnenen Opalinus-Ton spezifischen Bakterien
- Fortsetzung der Untersuchungen zur Wechselwirkung der Ton-Isolate *Sporomusa* sp. mit U(VI) und *Paenibacillus* sp. mit U(VI) und Cm(III)
- Fortsetzung Biofilm-Experimente mit *P. fluorescens*; Beginn Untersuchungen zur Eu(III)-Wechselwirkung, TEM-Untersuchungen
- Fortsetzung der potentiometrischen Titrations mit *Sporomusa* sp. und *Paenibacillus* sp.
- Untersuchungen zur Wechselwirkung von Eu(III) mit *Sporomusa* sp.
- Planung und Durchführung spektroskopischer Untersuchungen von Cm(III) mit Sporen von *Sporomusa* sp.
- Planung und Beginn der Untersuchungen mit Pu: Präparation und Charakterisierung der Pu(VI) Stammlösung für die bakteriellen Wechselwirkungsexperimente
- Beginn der Auswertungen der ROBL-Messproben (Strukturergebnisse zu bakteriellen U(VI)-Spezies)
- Vervollständigung der Datenbank Wechselwirkung von Mikroorganismen mit Actiniden

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zwei Beiträge im Jahresbericht des IRC 2010: HZDR-001 (2011) www.hzdr.de/FWR/DOCS/JB2010Netz.pdf

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10639
Vorhabensbezeichnung: Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtsformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2009 bis 31.12.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 283.149,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Arbeiten sollen als Ergebnis eine analytische Einschätzung der sicherheitstechnischen Relevanz und der praktischen Umsetzbarkeit aller relevanten Überwachungsaspekte liefern. Insbesondere die Konsequenzen, die sich aus möglichen, messtechnisch beobachteten, Abweichungen von Erwartungswerten ergeben, sollen diskutiert werden. Mögliche Folgerungen für den Einsatz von Überwachungssystemen, insbesondere als Datenlieferant für Entscheidungsprozesse, sollen aufgezeigt werden.

Als erster Schritt wird eine Auswahl repräsentativer Überwachungskontexte getroffen. Die Ziele und Strategien werden dann tatsächlichen Prozessen und Parametern zugewiesen, die überwacht werden müssen. Im Anschluss daran werden entsprechende Überwachungssysteme konzipiert und hinsichtlich ihrer Zuverlässigkeit, speziell im Hinblick auf die Signaldiagnostik untersucht. Zuletzt werden Nutzen und Konsequenzen der Überwachungsergebnisse charakterisiert und bewertet. Hierzu wird eine Reihe von Szenarien mit erwarteten und unerwarteten Überwachungsergebnissen analysiert, und es wird untersucht, wie solche Ergebnisse zum Entscheidungsfindungsprozess in einer gestuften Endlagerung beitragen können.

Dieses Vorhaben wird in engem Zusammenhang mit dem EU-Projekt MoDeRn (Monitoring Developments for safe repository operation and staged closure) durchgeführt, an dem 13 Europäische Endlagerinstitutionen sowie Sandia (USA) und RWMC (Japan) beteiligt sind. Dieses Projekt hat zum Ziel, einen gemeinsamen internationalen Rahmen bzw. eine übergreifende und umfassende Strategie zur Endlagerüberwachung verfügbar zu machen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Strategie und Ziele einer Endlagerüberwachung
- AP2: Fallstudien zur Endlagerüberwachung
- AP3: Techniken zur Endlagerüberwachung
- AP4: Szenarienanalyse zur Endlagerentwicklung unter Überwachungsaspekten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Am 04. und 05. Mai 2011 fand in Oxford, England, ein Workshop mit Stakeholdern aus verschiedenen europäischen Ländern statt. Ziel dieses Workshops war es zum einen, den verschiedenen Interessengruppen das Vorhaben vorzustellen und zu erläutern, was die internationalen Projektpartner mit dem Vorhaben erreichen wollen. Zum anderen war vorgesehen, die Stakeholder etwa in der Mitte der Projektlaufzeit in die laufenden Arbeiten einzuführen und die wichtigsten Themen mit ihnen zu diskutieren. Damit sollte gewährleistet werden, dass die Interessen der Stakeholder in die Arbeiten des Vorhabens einfließen können, so dass insgesamt eine Rahmenrichtlinie auf breiter internationaler Akzeptanz entsteht. Die Diskussionen auf dem Workshop waren sehr fruchtbar und konstruktiv, so dass der Workshop insgesamt sehr erfolgreich war.

AP2:

Anhand von drei Fallstudien für die Wirtsgesteine Salz, Tonstein und Granit wurden die jeweils als überwachungsrelevant anzusehenden Parameter zusammengestellt. Die drei Fallstudien beziehen sich neben den drei unterschiedlichen Wirtsgesteinen auch auf drei verschiedene Endlagerkonzepte aus Deutschland, Frankreich und Schweden. Basierend auf den erstellten Parameterlisten wurde im Fall des deutschen Konzeptes (Salz) geprüft, ob alle identifizierten Parameter basierend auf dem aktuellen Stand der Technik auch tatsächlich messtechnisch erfasst und damit überwacht werden können. Im Ergebnis bleibt festzuhalten, dass, wenn auch nicht alle, so doch ein Großteil der Parameter gemessen bzw. in ihrer Entwicklung überwacht werden könnten. Abschließend wurde ein Konzept skizziert, wie ein diesbezügliches Monitoring-System generell aussehen könnte.

Am 07.06. und 08.06.2011 fand der fünfte interne Workshop im Rahmen dieses Vorhabens in Prag statt. Der Workshop wurde vom Projektpartner RAWRA ausgerichtet. Im Rahmen dieses Workshops wurde die Fallstudie Salz vorgestellt und diskutiert und die weiteren Arbeiten abgestimmt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Inhaltliche Vorbereitung zwei weiterer Workshops, einem projektinternen bei NRG in Amsterdam zur inhaltlichen Diskussion der Arbeiten in den einzelnen Arbeitspaketen und eines konzeptionellen Workshop zur Ausarbeitung der einzelnen Schritte zur Erstellung eines „Reference Frameworks“ als internationale Rahmenrichtlinie für ein Endlager-Monitoring.
- AP2: Fortführung der Fallstudien zur langzeitlichen Überwachung eines Endlagers in ausgewählten Wirtsgesteinen unter Berücksichtigung unterschiedlicher Endlagerkonzepte.
- AP3: Aufarbeitung und Dokumentation des Standes von Wissenschaft und Technik im Bereich geotechnischer und geophysikalischer Überwachungssysteme.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine	Förderkennzeichen: 02 E 10649
Vorhabensbezeichnung: Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA)	
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2009 bis 30.09.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011
Gesamtkosten des Vorhabens: 975.614,00 EUR	Projektleiter: Bollingerfehr

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die hydraulischen Eigenschaften der Verschlussbauwerke in einem HAW-Endlager sind wesentlich für die zuverlässig dauerhafte Isolation der eingelagerten Schadstoffe von der Biosphäre. Erfahrungen aus bestehenden Untertagedeponien im Salinar belegen, dass die integrale Permeabilität eines Verschlussbauwerks bei sachgemäßer Ausführung durch die Auflockerungszone (ALZ) im konturnahen Streckenbereich bestimmt wird. Verheilungsprozesse sind in der ALZ zwar zu erwarten, jedoch lassen sich diese gegenwärtig weder hinsichtlich ihrer Geschwindigkeit noch in ihrer Auswirkung auf die Permeabilität belastbar quantifizieren. Die Reversibilität der Riss-schließung lässt sich ferner unter ungünstigen Bedingungen, insbesondere bei hydraulischen Beanspruchungen nicht ausschließen, so dass die Abnahme der Permeabilität aufgrund des Verheilungsprozesses letztlich nicht hinreichend prognostizierbar ist. Eine Schließung dieser Erkenntnis-lücke stößt auf erhebliche praktische Probleme. Da die Verheilungsprozesse relativ zur Dauer der Betriebsphase über äußerst lange Zeiträume ablaufen, wird der Verifizierung einschlägiger Prozesse eine belastbare Grundlage entzogen. Daher ist eine qualitätsgesicherte Vergütung der ALZ durch Injektionen von Vorteil, um den Anforderungen an die Abdichtung nachweislich zu genügen.

Ziel des Vorhabens ist es, ein Nachweisverfahren für die Abdichtung der an ein Verschlussbauwerk anliegenden Auflockerungszone in einem HAW-Endlager zu entwickeln. Das Vorhaben beinhaltet technische und konzeptionelle Aspekte zur Injektion von Wasserglas in die ALZ im Salinar. Durch In-situ-Injektionen und Untersuchungen zur mechanischen und chemischen Stabilität von Salz-Wasserglas-Systemen soll die technische Eignung des Verfahrens für den Einsatz im Endlagerbau nachgewiesen werden. Die Modellierung der injektionsbedingten Änderung von Permeabilitätseigenschaften, insbesondere Konnektivitäten, und ihr Einfluss auf die Permeationsprozesse durch die ALZ soll die Grundlage für den bautechnischen Nachweis an die Anforderungen der Vergütungsmaßnahme liefern.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Implementierung einer Simulationsumgebung für Injektionen in die ALZ
- AP2: Versuchsprogramm zur Untersuchung von Wasserglas als Injektionsmittel im Steinsalz
- AP3: Durchführung von Injektionen und Datengewinnung
- AP4: Simulation der Injektion von Wasserglas in ein reales Kluftsystem
- AP5: Aufbereitung der Ergebnisse zu bautechnischen Empfehlungen
- AP6: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Die Nachrechnungen von Laborversuchen zur Kalibrierung relevanter mechanischer Mikroparameter wurden abgeschlossen. Bezüglich der Modellierungstiefe mussten dabei Einschränkungen vorgenommen werden, da sich eine vollständige Umsetzung aller relevanten physikalischen Prozesse derzeit als nicht machbar darstellte. Aktuell laufen Berechnungen zur Kalibrierung der hydraulischen Mikroparameter (Rissöffnungsweiten). Ferner wurden hydraulisch-mechanisch gekoppelte Modellierungen gestartet, um die in der ALZ herrschenden Schädigungsprozesse im Korngrößenmaßstab zu visualisieren sowie eine damit verbundene Permeabilitätssteigerung zu quantifizieren.

AP2:

Das Versuchsprogramm zur Bewertung der Langzeitbeständigkeit von Silikatgel in salinaren Lösungen wurde beendet. Es liegen Ergebnisse von chemischen, röntgenographischen und spektroskopischen Untersuchungen des Probematerials bzw. der Reaktionslösungen vor. Die Literaturrecherche zur Übertragbarkeit auf natürliche geochemische Prozesse wurde weitergeführt.

AP3:

Das abgestimmte Untersuchungsprogramm für die In-situ-Injektionsarbeiten wurde fortgeführt und beendet. Dabei wurden als Wiederholungsmessungen zu den initialen Konturpermeabilitäten (Indexwerte vor Beginn der Untersuchungen) die Konturpermeabilitäten nach einer Standzeit von ca. 6 Monaten bestimmt. Im Folgenden wurden ausgewählte Messpunkte für die oberflächennahe Injektion vorbereitet (Erstellung eines Injektionskanals) und die Permeabilität für diesen Zustand bestimmt. Im Anschluss wurden an diesen ausgewählten Messpunkten die Injektionsversuche (Oberflächennahe Injektion mit Oberflächenpackern) mit Natronwasserglas durchgeführt. Zum Abschluss der In-situ-Untersuchungen wurden an den injizierten Messpunkten die Permeabilitätsmessungen wiederholt. Alle Permeabilitätsmessungen und Injektionsversuche wurden messtechnisch erfasst und ausgewertet. Die Messdaten und Ergebnisse sind in Berichtsform zusammengefasst.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Bewertung erweitertes Modellierungskonzept; Anpassung der modelltech. Mikroparameter
Permeabilitätsentwicklung generierter Rissnetzwerke mittels hydraulischer Modellierungen
Entwicklung eines Konzeptes zur Simulation eines Injektionsversuches

AP2: Auswertung und Dokumentation der Versuche zur chemischen Langzeitstabilität
Ermittlungen rheologischer Eigenschaften von Natron-Wasserglas im Kontakt mit Halit
Ermittlungen der Festigkeitseigenschaften des Silikat-Salz-Systems

AP3: Auswertung In-situ-Injektionen zur Erstellung von bautechnisch. Empfehlungen (s. AP5)

AP4: Simulation Injektion von Wasserglas auf Basis der Ergebnisse von AP1, AP2 und AP3

AP5: Aufbereitung der Ergebnisse zu bautechnischen Empfehlungen

AP6: Erstellen des Abschlussberichtes

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 10659
Vorhabensbezeichnung: Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2009 bis 31.03.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 84.968,00 EUR	Projektleiter: Dr. Popp	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vor dem Hintergrund der Gasbildung in einem Endlager sind aus Sicht der Langzeitsicherheit die bisher vorliegenden Forschungsergebnisse zum Gastransport in Bentonit-Dichtelementen, die universell in verschiedenen Endlagerkonzepten vorgesehen sind, nicht ausreichend. Die generelle Zielsetzung dieses Vorhabens besteht in der Untersuchung der Gastransporteigenschaften (z. B. kapillarer Sperrdruck, relative Gas-Permeabilitäten) und der gekoppelten hydraulisch/mechanischen Eigenschaften von Trennfugen zwischen Bentonit-Formsteinen. Schwerpunktmäßig soll dabei die Entwicklung der Gaspermeabilität nach erfolgter (Teil-) Aufsättigung des Bentonits sowie deren Änderung in Abhängigkeit von der sich mit einer Quellung entwickelten Normalspannung bzw. unter Wirkung einer Scherspannung untersucht werden. Hierfür ist die Nutzung neuer Untersuchungsverfahren notwendig.

Das Vorhaben wird im Rahmen des von der Europäischen Gemeinschaft über das 7te Euratom als „Collaborative Project“ geförderten Forschungsvorhabens „Fate of Repository Gases“ (FORGE) durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Darstellung des aktuellen Kenntnisstandes zum Gastransportverhalten von kompaktierten Bentonit-Formsteinen unter besonderer Berücksichtigung von Trennflächen
- AP2: Realisierung der technischen Rahmenbedingungen für Durchströmungsversuche an Bentonitprüfkörpern mit gleichzeitiger Messung des Quelldruckverhaltens
- AP3: Durchführung von Langzeitinjektionstests an Trennflächen zwischen Bentonit-Formsteinen mit Wasser bzw. nachfolgend Gas
- AP4: Durchführung von Langzeitinjektionstests an Kontaktflächen zwischen Bentonit-Formsteinen und Tonsteinoberflächen mit Wasser bzw. nachfolgend Gas - analog AP3
- AP5: Verformungsversuche im direkten Schergerät an Kontaktflächen zwischen Formsteinen aus Bentonit-Formsteinen einschließlich einer Wasser- bzw. Gasinjektion in der zweiten Versuchsphase
- AP6: Umsetzung der gewonnenen Materialparameter in ein für die Beschreibung der Kontaktflächeneigenschaften von Trennflächen geeignetes Stoffmodell und Validierung des Stoffmodells durch Nachrechnung der Laborversuche
- AP7: Zusammenstellung der Ergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum fand vom 13.04. bis 14.04.2011 das AP3 - Arbeitstreffen in Lille (F) statt, wobei die bisherigen Ergebnissen zusammenfassend vorgestellt und diskutiert wurden.

AP3: Mittels der im Rahmen des Vorhabens neu konstruierten Durchströmungszellen wurden in drei Langzeitversuchen künstliche Trennflächen zwischen Bentonitformsteinen kontrolliert bewässert und der Bentonit zum Quellen gebracht. Dabei wurden sowohl unterschiedliche Durchströmungsgeometrien (radial bzw. axial) als auch verschiedene Belastungen realisiert, ohne dass sich signifikante Unterschiede in der Wasseraufnahme zeigten.

Obwohl die Proben noch nicht vollständig aufgesättigt waren, wurden mit Gasinjektionstests unter kontrollierten Injektions- und Lastbedingungen begonnen (eine axiale Dehnung der Proben senkrecht zur Trennfläche wurde unterdrückt). Trotz der noch nicht vollständigen Aufsättigung der Proben wurden sehr hohe Gaseindringdrücke (mehrere MPa über der axialen Druckeinspannung bzw. über dem gemessenen Quelldruck) nachgewiesen. Während im Lieferzustand der Proben noch unterschiedliche Gaspermeabilitäten von ca. 4 Größenordnungen zwischen der Matrix- und Trennflächendurchlässigkeit bestimmt wurden, konnte bei den Gasinjektionstests keine Abhängigkeit der Gasaufnahme-fähigkeit von der Einströmrichtung zur Trennfläche festgestellt werden. Im Ergebnis wird gefolgert, dass der Effekt der ursprünglichen Trennflächen mit höherer Durchlässigkeit durch die Bentonitaufsättigung offenbar verschwunden ist, d. h., dass die Trennflächen verheilt sind.

AP5: Ausgehend von den aufgesättigten Proben wurden Scherversuche zur Bestimmung der Kontaktflächenscherfestigkeit der vorliegenden Trennflächen sowie zwischen feuchtem Bentonit und der natürlich rauen Gebirgsoberfläche (Granit) durchgeführt. Es zeigt sich, dass gegenüber den trockenen Materialeigenschaften sich in den befeuchteten Trennflächen eine Kohäsion von ca. 0,6 MPa ausgebildet hat. Damit wird der in den Gasinjektionstests angedeutete Prozess einer „Verheilung“ quantitativ nachgewiesen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP3: Fortsetzung der experimentellen Untersuchungen mit Aufsättigung der Bentonitkörper unter sukzessiver Messung der Gas-Permeabilität bzw. des kapillaren Sperrdrucks.

AP5: Untersuchung der Scherfestigkeit von Bentonit-Formsteinen zu strukturierten Tonstein- bzw. Kristallinoberflächen (Simulation der entsprechenden Oberflächenrauigkeit) – Durchführung von Fluidinjektionstests während der Scherung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10669
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2009 bis 30.04.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 263.900,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelle Arbeiten (INE)
- AP1.1: Laborprogramm zu Mechanismen der Kolloid-RN-Kluftmineral-Wechselwirkung
- AP1.2: In-situ-Experimente zur kolloidgetragenen RN-Migration
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/INE)
- AP2.1: Parametrisierung von TRAPIC (GRS)
- AP2.2: Vorausberechnung für das CFM Experiment (GRS)
- AP2.3: Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP2.4: Modellrechnungen zum Standort Äspö (GRS)
- AP2.5: Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen (INE)
- AP3: Integration und Abschlussdokumentation (GRS/INE)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Optimierung aller d^3f - und r^3t -Rechnungen für das Uranin-Tracer-Experiment 08-02 und das CFM Homolog-Experiment 10-01. Der Transport des idealen Tracers Uranin wurde für Experiment 10-01 optimiert und beschreibt mit den Daten auch 08-02 sehr gut. Für die Kolloide wurde eine kinetisch kontrollierte, reversible Rückhaltung in der Modellierung berücksichtigt, die Anstieg und Tailing der Kolloid-Durchbruchskurve des Experimentes sehr gut wiedergibt und zu einer sehr guten Beschreibung der Homologe führt.

Erstellung eines Modells und Vorbereitung von Rechnungen zum Einfluss der für das integrierte Experiment neu gebohrten Beobachtungsbohrlöcher auf Strömungsfeld und Transport des Dipols CFM06-002 – Pinkel.

AP3: Durchführung eines weiteren Arbeitsgesprächs mit dem FZK-INE und CFM-Partnern von der KTH Stockholm in Berlin zur Diskussion der aktuellen Ergebnisse, Klärung offener Fragen und Vorbereitung einer Veröffentlichung.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Die Daten für die Experimente 10-03, 10-04 und für das im Dezember 2010 unter reduzierten Ausstrombedingungen von 25 ml/min durchgeführte Feldexperiment mit Uranin und LiBr als sorbierenden Tracer sollen im Juli 2011 zur Verfügung gestellt werden. Anschließend Durchführung weiterer d^3f - und r^3t -Rechnungen für alle Experimente.

Orientierende r^3t -Rechnungen mit Quellterm zur Berücksichtigung der Kolloid- und Radionuklidmobilisierung aus dem Bentonitkörper für das ab Dezember 2011 geplante, integrierte Experiment.

AP3: Durchführung eines weiteren Arbeitsgesprächs mit dem FZK-INE zur Diskussion der Ergebnisse.

Teilnahme an dem nächsten Treffen der CFM Modeller Group mit Präsentation der Ergebnisse der neuen Modellrechnungen.

Erstellung eines Papers gemeinsam mit den anderen Modellierer-Gruppen zur Simulation des kolloidgetragenen Transports schwerpunktmäßig für das Homolog-Experiment 10-01.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10679
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2009 bis 30.04.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 488.918,00 EUR	Projektleiter: Dr. Schäfer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Der Kenntnisstand zur Kolloidproblematik, speziell zur Prognostizierbarkeit der Kolloidstabilität und Kolloid-Mineraloberflächen-Wechselwirkung hat in den letzten Jahren nicht zuletzt durch das Vorgängerprojekt KOLLORADO sehr große Fortschritte gemacht und wir können z. B. die Stabilität kolloidaler Phasen mittels elektrostatischer Modellansätze beschreiben. Weiterhin wurden qualitative Daten zur Erosion der Bentonitbarriere generiert, die bisher nicht im Widerspruch zu den Kolloidstabilitäts-Arbeiten stehen. Alle Daten zum kolloidgetragenen Radionuklidtransport weisen auf eine starke Abhängigkeit der Kolloidmobilität von der Kluffgeometrie hin, wobei drei- und vierwertige Actinide und ihre Homologe zu 90-99 % von der Oberfläche der Kolloide unter den bisher untersuchten Verweilzeiten dissoziieren.

Hauptziel des Anschlussvorhabens ist es, weiterhin das mechanistische Verständnis der Erosion des kompaktierten Bentonits und der Radionuklid-Kolloid-Wechselwirkungen unter naturnahen Bedingungen zu verbessern und die Relevanz des kolloidgetragenen Radionuklidtransports hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Endlagers in einer Hartgesteinsformation zu bewerten. Darüber hinaus werden generische Aussagen zur Kolloidrelevanz erarbeitet. Der Beitrag des INE, auf den sich der vorliegende Bericht bezieht, konzentriert sich auf experimentelle Arbeiten im Labor und im Untertagelabor Grimsel sowie die begleitende Erstellung hydraulischer Modelle. Die Arbeiten der GRS fokussieren sich auf die Anwendung, Weiterentwicklung und Qualifizierung von Rechenprogrammen für die Langzeitsicherheitsanalyse.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelle Arbeiten (INE)
- AP1.1: Mechanismen der Kolloid-Radionuklid-Kluftmineral Wechselwirkung
- AP1.2: Kolloidgetragene Radionuklid-Migration
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/INE)
- AP2.1: Simulationsrechnungen für die Säulenexperimente (GRS)
- AP2.2: Simulationsrechnungen für die CFM Homolog- Experimente (GRS)
- AP2.3: Simulationen für den Mock-Up Test und das integrale CFM Experiment (GRS)
- AP2.4: Bewertung des kolloidgetragenen Radionuklidtransports (GRS)
- AP2.5: Numerische Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen im Kristallin (INE)
- AP3: Integration und Abschlussdokumentation (Executive Summary) (GRS/INE)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Status:

Der Mitte September 2010 eingestellte Postdoktorand Herr Dr. Patrick Höss hat sich in die Thematik des Projektes eingearbeitet und führt einen Teil der neuen, mit GRS abgestimmten Laborversuche durch. Nach Rücksprache mit dem Projektträger über die Schwierigkeiten der Besetzung der zweiten Doktorandenstelle wurde

zum 1. Juni 2011 ein weiterer Postdoktorand mit Herrn Dr. Gopala Darbha eingestellt, der speziell die Arbeiten zum Einfluss von Oberflächenrauigkeit und Ladungsheterogenitäten auf die Kolloidmobilität durchführen wird. Schwerpunkt der Arbeiten des 1. Halbjahres 2011 lagen (a) auf der Analyse von Migrationsversuchen unter Variation der Verweilzeit in der Migrationsscherzone, (b) Analyse der Proben aus dem geochemischen Hintergrund-Monitoringprogramms und (c) Laborstudien zur Machbarkeit der Platzierung des kompaktierten Bentonits.

- (a) In dem September 2010 durchgeführten „Homologen“-Test (Run CFM10-03) mit den Elementen Eu, Tb, Th, Hf, unter Anwesenheit von Bentonitkolloiden und einer Extraktionsfließgeschwindigkeit von 10mL/min konnte ein Wiedererhalt des konservativen Tracers Uranin von nur ~20 % quantifiziert werden, während der Kolloid-Wiedererhalt überraschenderweise bei $\sim 40 \pm 10$ % (ICP-MS Al-Analyse) lag. Der Wiedererhalt der eingesetzten Elemente konnte mit 51 ± 2 % Th(IV), 50 ± 11 % Hf(IV), 15 ± 7 % Eu(III) und 6 ± 2 % Tb(III) quantifiziert werden, während die Analysen der Proben mittels LIBD und S-Kurven LIBD auf eine Mobilisierung von natürlichen Kolloiden aus der Scherzone hinweisen und keine exakte Quantifizierung der eingesetzten Bentonit-Kolloide zulassen. Auf Grund des niedrigen Uranin-Wiedererhalt wurde ein Laborprogramm zur Uranin-Bentonit Wechselwirkung unter Variation des pH-Wertes, Uranin- und Bentonitkonzentration gestartet, sowie Untersuchungen zum Bleichungsverhalten des Fluoreszenztracers. Auf Grund der Laborergebnisse ist Ende Juli ein weiterer „Homologen“-Test unter identen Versuchsbedingungen wie in Run 10-03 geplant. In einem weiteren Tracertest (Run 10-04; Injektionsstart 8.12.2010) mit Uranin und LiI als konservativen Tracern und einer Extraktionsfließgeschwindigkeit von 25 mL/min konnten Wiedererhalte von 97.6 % für Li ($M_0=259.3$ mg; Basislinie 90 ppb; $M_{rec.}$: 253.1 mg), 93.1 % für Iodid ($M_0=4740.7$ mg; Basislinie 80 ppb; $M_{rec.}$: 4413 mg) und 89.8 – 92 % Uranine (on-line and off-site analysis) bestimmt werden. Die von INE gemessenen Daten wurden den CFM-Partnern des Modellierungsteams zur Verfügung gestellt und erlauben Aussagen zum Einfluss der Matrixdiffusion unter den gewählten hydraulischen Bedingungen. Die bisher durchgeführten Kolloid/Homolog- Tracertests zeigen einen kolloidassoziierten Radionuklidtransport auch bei hohen Verweilzeiten, und keine signifikante Verringerung der Wiedererhalte mit der 2,75fach höheren Aufenthaltszeit in der Scherzone.
- (b) Nach Installation eines Autosamplers mit Schutzgasatmosphäre Dez. 2010 am „Pinkel“- Oberflächenpacker ist eine systematische wöchentliche Probenahme und damit die Quantifizierung der natürlichen Schwankungsbreite der Kolloidkonzentration innerhalb eines Jahres gewährleistet und Unsicherheiten des Kolloidaustrags im „integralen CFM Experiment“ werden minimiert. Die Analyse der Proben auf Eh, pH, Anionen, Kationen, DOC und Kolloidkonzentration sowie –größenverteilung wird am INE durchgeführt.
- (c) Studien zum Verhalten von synthetischem Montmorillonite (Zn- bzw. Ni markiert) in Kollaboration mit Univ. Nancy und Univ. Mulhouse wurden gestartet. Weitere Experimente fokussieren auf dem „Spiken“ des kompaktierten Bentonits mit stark und schwach sorbierenden Tracern als Machbarkeitsstudie des integralen Experiments.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.1: Ergänzende Batch-Experimente an synthetischen Montmorillonit mit Pu, Np, Am zur genauen Bestimmung der Kolloidanlagerungswahrscheinlichkeit α sind geplant.
- AP1.2: Die Analyse der Proben des neuen Homolog- Tests (Run11-01) mittels ICP-MS, LIBD und S-Kurven LIBD (Kolloidkonzentration und –größenverteilung) obliegt dem INE. Das Radionuklid- Migrationsexperiment wurde auf Grund der Unsicherheiten bezüglich der Wiedererhalte auf das 2. Halbjahr 2011 verlegt.
- AP2.5: Modellrechnungen zu den *In-situ*-Experimenten Run 10-01/10-03 werden weitergeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Darbha, Schäfer, Heberling, Lüttge, Fischer (2010) Retention of Latex Colloids on Calcite as a Function of Surface Roughness and Topography. *Langmuir*, 26: 4743-4752.

Schäfer, Huber, Seher, Missana, Alonso, Kumke, Eidner, Claret, Enzmann, (2011, accepted) Nanoparticles and their influence on radionuclide mobility in deep geological formations. *Appl. Geochemistry*.

Huber, Kunze, Geckeis, Schäfer (2011, accepted) Sorption reversibility studies on the interaction of radionuclides with FEBEX bentonite colloids/nanoparticles under Grimsel groundwater conditions in the presence of fracture filling material. *Appl. Geochemistry*

Huber, Enzmann, Wenka, Bouby, Dentz, Schäfer (2011, submitted) Natural micro-scale heterogeneity induced solute and nanoparticle retardation in fractured crystalline rock. *J. Contam. Hydrol.*

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10689	
Vorhabensbezeichnung: Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche			
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2009 bis 31.12.2013		Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 863.089,00 EUR		Projektleiter: Wieczorek	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Laboruntersuchungen an Tonstein und Puffermaterial

AP2: Erhitzerversuch in Mont Terri

AP3: Prozessmodellierung

AP4: Langzeitsicherheitsbetrachtung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die ersten Untersuchungen zur Ermittlung der wärmetechnischen Parameter wurden an granularem Ton-Sand-Material (35 % MX-80 und 65 % Sand) und an Proben aus den Lagerblöcken der Erhitzer (hochkompakter Bentonit) bei verschiedenen Temperaturen zwischen 20 °C und 105 °C vorgenommen. Für beide Probenarten wurde eine geringe Abnahme der Wärmeleitfähigkeit mit der Temperatur festgestellt, was u. a. auf eine Abnahme der noch im Material befindlichen Feuchte zurückgeführt werden kann. Bei den Messungen wurden die zu jeder Temperaturstufe gehörigen Wassergehalte ermittelt. Hier war eine Reduzierung des Wassergehalts im betrachteten Temperaturbereich von ca. 11.8 % bei 20 °C bis auf ca. 2.3 % festzustellen. Die zugehörigen Wärmeleitfähigkeiten nahmen im Mittel von ca. 1.22 W/(m*K) bis auf 0.83 W/(m*K) ab. Mit Untersuchungen zur reinen Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit an getrockneten Proben wurde begonnen.

AP2: Der Erhitzerversuch HE-E wurde im VE-Mikrotunnel im Mont Terri URL komplett aufgebaut. Von GRS wurden im Mikrotunnel 10 Minipackersonden zur Porenwasserdruck- und Permeabilitätsmessung sowie 10 Temperaturfühler installiert. Zusätzlich wurden von der Gallery 98 aus zwei Vierfachpackersonden installiert, deren Notwendigkeit sich aus den Auslegungsrechnungen ergeben hatte. Mit allen Packersonden wurden Injektionstests zur Bestimmung der Gebirgspermeabilität vor Aufheizbeginn durchgeführt, die zurzeit ausgewertet werden. Am 28.06.2011 wurden die Erhitzer eingeschaltet.

AP3: Zur Auslegung des Erhitzerversuchs wurden Modellrechnungen von GRS, UPC und TK Consult durchgeführt, die übereinstimmend zeigten, dass Porendruckänderungen insbesondere in einem Bereich zu erwarten sind, der nach den ersten Planungen nicht mit Messgebern versehen war. Dieses Manko wurde korrigiert (s. o.). Beim Projekttreffen im Peking vom 23. bis 27.05.2011 wurden Status und weitere Planung der Modellierungsarbeiten diskutiert, insbesondere wurde die Strategie der Modellierungsteams bei der Extrapolation der Rechnungen auf lange Zeiten vorgestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Laboruntersuchungen zu Wärmeleitfähigkeit, Temperaturleitfähigkeit und Wärmekapazität von Tonstein und Sand-Bentonit-Material an trockenen Proben und in Abhängigkeit von der Feuchte bei Raumtemperatur.
- Durchführung des Erhitzerversuchs in Mont Terri
- Modellierung des Erhitzerversuchs und Extrapolation auf lange Zeiträume; zusätzlich Koordinierung des Arbeitspakets Modellierung
- Analyse der Ergebnisse der experimentellen Arbeiten und der Prozessmodellierung hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Tonendlagers

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10699
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt KIT: Thermodynamische Datenbasis für Radionuklide		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2009 bis 30.09.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 444.095,00 EUR	Projektleiter: Dr. Marquardt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es wird eine einheitliche, umfassende und konsistente thermodynamische Referenzdatenbasis für ausgewählte Radionuklide entwickelt, die zur geochemischen Modellierung von Nah- und Fernfeldprozesse eines Endlagers für radioaktiven Abfall eingesetzt werden soll. Es werden bereits bestehende, qualitativ hochwertige Datenbasen für Radionuklide zusammengeführt, auf Konsistenz geprüft, validiert und die Behandlung und Bewertung sorgfältig dokumentiert. Parallel dazu wird eine Datenbank entwickelt, in der die Daten integriert werden. Dieses Projekt läuft in Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), dem Institut für Radiochemie des Forschungszentrums Dresden-Rossendorf (FZD), der TU Bergakademie Freiberg und der AF Colenco AG.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Datenerfassung: a) Ableitung von sinnvollen Schätzwerten für unbekannte Komplexbil- und Löslichkeitskonstanten sowie Ion-Ion-Wechselwirkungsparametern nach dem Pitzer-Modell und der SIT; b) Zuverlässiger Satz an Gleichgewichtskonstanten für tetravalente Actiniden in carbonathaltigen Systemen; c) Erweiterung der Datenbasis um das Element Zirkonium; d) Datenbasis für Radionuklide: Erfassung der thermodynamischen Daten für die Radionuklide Tc, Th, Np, Pu, Am und Cm, die in der Phase I nicht berücksichtigt werden konnten.
- AP2: Datenbewertung: Die Zuordnung von Qualitätsstufen, insbesondere für Bildungsdaten, wird vertieft und vervollständigt. Qualitätsmanagement und Dokumentation: Erstellung von Qualitätsrichtlinien, Archivierung von Quellenangaben und Rechnungen zur Validierung von Daten.
- AP3: Qualitätsmanagement: Testrechnungen mit den Rechencodes Geochemists Workbench (GWB) und EQ3/6 zur Löslichkeit und Speziation von Actiniden in bekannten Salzlösungen. Ziel der Testrechnungen mit den THEREDA-Daten ist es zu prüfen, inwieweit verifizierte Rechencodes und mit Hilfe der erstellten Parameterdateien in der Lage sind, die Gleichgewichte in komplexen Lösungssystemen zu beschreiben.
- AP4: Dokumentation: Erstellung und Pflege des Handbuchs bzw. Nutzerhandbuchs, einer Anleitung der Nutzer zur korrekten und effizienten Benutzung der Datenbasis. Das INE liefert

dazu Beiträge z. B. zu den Richtlinien, Ableitung von Schätzwerten und anderen Kapitel. Eine kontinuierliche Pflege auf Grund zunehmender Resonanz der Nutzer ist notwendig.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Datenerfassung:

Die Datenzusammenstellung und Evaluierung des fünfwertigen Neptuniums für das System der ozeanischen Salze wurden fortgeführt. Der Fokus lag hierbei auf den Daten zur Bildung von Chlorid- und Sulfatkomplexen. Die in der Literatur erwähnten Studien bezüglich der Chloridkomplexe beantworten nicht die Frage, ob diese Komplexe überhaupt gebildet werden, da es sich wenn überhaupt um sehr schwache Komplexe handelt, oder ob die experimentellen Beobachtungen nur auf eine Änderung der Aktivitätskoeffizienten beruhen. Spektroskopische und potentiometrische Untersuchungen zeigen keine Komplexbildung, in Untersuchungen mittels thermodynamischer Phasengleichgewichtseinstellungen werden ein $\text{NpO}_2\text{Cl}(\text{aq})$ - und bei höheren Ionenstärken ein $\text{NpO}_2(\text{OH})_2^-$ -Komplex abgeleitet. In neueren Veröffentlichungen wird allerdings gezeigt, dass es von Vorteil ist, die experimentellen Ergebnisse nur mit Wechselwirkungsparametern – sowohl nach SIT als auch nach der Pitzer-Theorie – zu beschreiben. Dieser Ansatz wird auch für THEREDA favorisiert. Derselbe Ansatz wird für die schwache Sulfatkomplexierung von Np(V) angewendet. Da der Basissatz an Pitzer-Parameter für das Salzsysteem leicht geändert wurde gegenüber dem bisher in allen Veröffentlichungen benutzten Satz nach Harvie-Moeller-Weare, müssen derzeit laufende Testrechnungen zeigen, ob die vorhandenen Daten noch konsistent sind innerhalb der experimentellen Fehler, oder ob neue Pitzerparameter berechnet werden müssen.

Dokumentation:

Die Handbücher, die derzeit nur in deutscher Sprache zur Verfügung stehen, wurden begonnen in englischer Sprache zu übersetzen. Der Fokus lag beim INE auf Kapitel 3. Gleichzeitig wird das Kapitel sowohl in der deutschen als auch in der englischen Fassung aktualisiert.

Die eingehenden Tests der Exporter wurden fortgeführt, indem die vom PhreeqC-Exporter generierte Parameterdatei eingehend getestet wurde. Hierzu wurden komplexere Testfälle, wie IP9- und IP21-Salzlösungen, herangezogen. In diesen Lösungen stehen Halit und Polyhalit in Gleichgewicht mit Anhydrit, Glauberit und Syngenit (IP9) bzw. mit Carnallit, Sylvit und Kainit (IP21). Mit Hilfe der Testrechnungen konnten programmtechnische Schwierigkeiten identifiziert werden, die auf Besonderheiten der Rechencodes basieren und die eine Anpassung der Parameterdateien und somit der -exporter erforderten. Nach einigen Diskussionen und Korrekturen konnten die Parameterdateien fehlerlos eingelesen werden und die Testrechnungen ergaben bei einem Vergleich mit ChemApp-Testrechnungen von der GRS und TU Freiberg ein konsistentes Ergebnis.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die thermodynamischen Daten für fünfwertiges Neptunium in carbonat-, und phosphathaltigen Wässern werden zusammengestellt und begutachtet. Mit den Np(V)-Daten wird die neue Eingabeoberfläche der Firma Lineas eingehend getestet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 10709
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt TUBAF: Ozeanische Salze und Carbonate		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2009 bis 30.09.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 178.770,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Voigt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundprojektes mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln und dem FZ Dresden/Rosendorf ist die Entwicklung einer einheitlichen, umfassenden und konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis zur geochemischen Modellierung von Nah- und Fernfeldprozessen für die derzeit in Deutschland diskutierten oder bereits realisierten Wirtsformationen untertägiger Entsorgungseinrichtungen. Hierzu bilden die beteiligten Projektpartner einen Kreis von Experten, der vorhandene thermodynamische Stoffgrößen sammelt, nach einheitlich vorher festgesetzten Kriterien bewertet und in einer Datenbank zusammenfasst. Besonderer Wert wird auf eine lückenlose Dokumentation und Rückverfolgbarkeit von Datenbankeinträgen gelegt. Es ist vorgesehen, den bereits in anderen Datenbanken vorhandenen Datenbestand zu integrieren. Die Datenbank hilft bei der Identifikation von Wissenslücken und beim Entwurf von Strategien zu deren Schließung.

Aufbauend auf dem bisher in Phase-I des Projektes THEREDA erstellten temperaturabhängigen (0 – 110 °C) Pitzer-Modell des 7-Komponenten-Systems bestehend aus dem hexären System der ozeanischen Salze einschließlich der sauren und basischen Lösungen (Na-K-Mg-Ca-SO₄-Cl-H-OH-H₂O) werden *in diesem Vorhaben auch die Carbonate der Alkali- und Erdalkalimetalle sowie die Gleichgewichte mit CO₂ im gleichen Temperaturbereich konsistent eingearbeitet. Dabei wird auch die Abhängigkeit der Lösegleichgewichte vom CO₂-Partialdruck berücksichtigt.*

Im Ergebnis des Vorhabens wird eine einheitliche, konsistente thermodynamische Datenbasis für geochemische Modellierungen zur Verfügung stehen, mit der das geochemische Milieu in Salinargesteinen einschließlich angrenzender oder eingelagerter Carbonatgesteine im relevanten Temperatur- und Druckbereich behandelt werden kann. Darüber hinaus bildet die in diesem Teilvorhaben zu entwickelnde Datenbasis mit den Bestandteilen Na⁺-K⁺-Mg²⁺-Ca²⁺-SO₄²⁻-Cl⁻-H⁺-OH⁻-HCO₃³⁻-CO₃²⁻-CO₂-H₂O die Grundlage für die Modellierung in den anderen Teilvorhaben, in denen diese Ionen bzw. Stoffe stets auch Lösungsbestandteile in unterschiedlichsten Konzentrationen darstellen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektmanagement (Berichtswesen, Treffen mit Projektpartnern, Intranet)
- AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation
(Definition von Richtlinien, Testrechnungen mit vom DB-Generator entwickelten Parameterdateien, Konsistenzprüfungen, Nutzerhandbuch)
- AP3: Datenmanagement: Datenbank, Filter, Parameterdateien
(Erstellung und Weiterentwicklung der Datenbankstruktur, Sicherstellung eines Archivierungsmodus, Interface zur Datenrecherche und -verarbeitung)

AP4: Datenbasis für Schwermetalle und Arsen (FZ Rossendorf, GRS Braunschweig)

AP5: Datenbasis für das System der ozeanischen Salze mit Carbonaten und CO₂ in Abhängigkeit von Druck und Temperatur (TU BAF). Die prinzipielle Vorgehensweise besteht in folgenden Arbeitsschritten:

- Selektion einer für die Datenbasis THEREDA geeigneten Form der Zustandsgleichung für reines CO₂ mit einer Gültigkeit von 0 °C bis 120 °C und Drucken bis 300 bar und ihre Implementierung in THEREDA.
- Erfassung und Systematisierung der Literatur zu thermodynamischen Daten und Phasengleichgewichtsuntersuchungen zu den angegebenen Systemen.
Systemkomplex 1: Reine Carbonat – CO₂ – Systeme
Systemkomplex 2: Chlorid - Carbonat – Systeme
Systemkomplex 3: Ternäre Sulfat - Carbonat – Systeme
Systemkomplex 4: Quaternär-reziproke Systeme Chlorid-Carbonat
Systemkomplex 5 + 6: Quaternär-reziproke Systeme Sulfat-Carbonat + Quaternäre Systeme mit gemeinsamen Carbonat- oder Hydrogencarbonat-Anion
- Bewertung bereits publizierter Modelle von Carbonatsystemen und falls möglich Einarbeitung in THEREDA
Die Bewertung umfasst:
 - das Nachrechnen der Modelle sowie publiziert, Vergleich mit exp. Daten
 - die evtl. Extrapolation in Konzentrations-, T-p-Bereiche, die für THEREDA erforderlich sind
 - die Prüfung auf Kompatibilität mit der existierenden Datenbasis von THEREDA für das hexäre System
 - falls möglich, Einarbeitung in die Datenbasis
- Modifizierung publizierter Modelle und Bestimmung fehlender Temperaturfunktionen für Wechselwirkungsparameter und Löslichkeitskonstanten
- Nachrechnen von Gleichgewichten und thermodynamischen Eigenschaften von Lösungen in den höheren Systemen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

Gemeinsam mit den Kooperationspartnern weitere Testrechnungen durchgeführt, um Unzulänglichkeiten bei der automatischen Generierung von Datenfiles zu beseitigen.

AP5:

- Technical Paper zur "Modellierung der Löslichkeiten im System CO₂-H₂O" im Druckbereich bis 300 bar und T bis 120 °C erstellt
- Benchmarkrechnungen für Carbonatsysteme bei 25 °C mit CHEMSAGE / CHEMAPP
- Freigabe der Datenbank für das System der ozeanischen Salze im Internet
- Beratung von Nutzern der Daten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung von AP5.2 Systemkomplex 1 und 2 im nächsten halben Jahr.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Interne Berichte - THEREDA.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10719
Vorhabensbezeichnung: Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2009 bis 31.05.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.0777.890,00 EUR	Projektleiter: Dr. Wolf	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung von alternativen Szenarien
- AP2: Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlusskonzepte
- AP3: Untersuchungen von Instrumentarien für Prozessanalysen
- AP4: Gasprozesse
- AP5: Detaillierte Untersuchungen zum Referenzszenario und zu Alternativszenarien
- AP6: Anwendbarkeit von Natürlichen Analoga
- AP7: Abschlussbericht / Publikation der ISIBEL-Ergebnisse

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP3: Die Aufnahme der Arbeiten ist erst im zweiten Halbjahr Jahr 2011 geplant, wenn erste wesentliche Ergebnisse der vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) vorliegen (siehe 8.). Die Planung der Arbeiten hat im ersten Halbjahr 2011 begonnen.
- AP4: Der Stand der Arbeiten für die Arbeitsschritte zur Freisetzung gasförmiger Radionuklide und der Lösungsmigration im Wirtsgestein wurde in einem Bericht (siehe 5.) dokumentiert und der Bericht der VSG zur Verfügung gestellt. Beide Prozesse sollten in der Sicherheitsanalyse berücksichtigt werden.
Für die Modellierung der Zweiphasenströmung im Grubengebäude wurden Vergleiche zwischen in Frage kommenden Rechenprogrammen vorgenommen. Dabei wurden auch Testrechnungen durchgeführt. Aus den Programmen Mufte, CodeBright, Hydrus und Tough2 wurde letzteres zur weiteren Verwendung in ISIBEL-II ausgewählt.
- AP5: Die Arbeiten an AP 5 wurden im ersten Halbjahr 2010 unterbrochen, um inhaltliche Überschneidungen mit der VSG zu vermeiden (siehe 8.). Die Planung, wie die Arbeiten unter Berücksichtigung der ersten Ergebnisse aus der VSG weitergeführt werden, wurde im ersten Halbjahr 2011 abgeschlossen.
- AP6: Im ersten Halbjahr 2011 wurde der Bericht zu diesem AP fertig gestellt (siehe 5.).

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Im zweiten Halbjahr 2011 wird mit den entsprechenden hydrogeologischen und geochemischen Modellrechnungen begonnen.
- AP4: Es werden Zweiphasenflussrechnungen mit dem Code Tough2 zur Modellierung verschiedener Strömungsvorgänge in einem Endlager im Salz durchgeführt.
- AP5: Im zweiten Halbjahr 2011 wird die Überprüfung des probabilistischen Instrumentariums an Hand der Ergebnisse und Diskussionen der VSG aus der Szenarienentwicklung und Konsequenzenanalyse begonnen.
- AP6: Die Arbeiten zu diesem AP sind abgeschlossen. Der Bericht wird im zweiten Halbjahr 2011 veröffentlicht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Rübel, A., Buhmann, D., Meleshyn, A., Mönig, J., Spiessl, S. (2011): Aspects on the gas generation and migration in repositories for high level waste in salt formations. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3592, Braunschweig.
- Wolf, J., Noseck, U. Meleshyn, A. (2011): Anwendbarkeit von Natürlichen Analoga für den Langzeitsicherheitsnachweis für ein HAW-Endlager im Salzgestein. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, im Druck.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10729
Vorhabensbezeichnung: Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2009 bis 31.05.2012	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 908.996,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krone	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung von alternativen Szenarien
- AP2: Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlusskonzepte
- AP3: Untersuchungen von Instrumentarien für Prozessanalysen
- AP4: Gasprozesse
- AP5: Detaillierte Untersuchungen zum Referenzszenario und zu Alternativszenarien
- AP6: Anwendbarkeit von Natürlichen Analoga
- AP7: Abschlussbericht / Publikation der KOMTESSA-Ergebnisse

DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für die Arbeitspakete 2 und 7 und bearbeitet im AP3 die Unterpunkte „gebirgsmechanische Berechnungen“ und „thermomechanische Berechnungen“.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

Schwerpunkt der Tätigkeiten bildete die Erörterung der Vorgehensweise zur Weiterentwicklung der Nachweismethodik für Verschlussbauwerke über lange Zeiträume mit dem Unterauftragnehmer TU Clausthal. Dazu wurden für Dichtelemente, die sich in ihrem Aufbau an das VSG-Verschlusskonzept anlehnen, für einzelne Grenzzustandsfunktionen Versagenswahrscheinlichkeiten ermittelt. Es erfolgte die Überprüfung von ermittelten Versagenswahrscheinlichkeiten, weiterhin wurden Ansätze recherchiert und überprüft, die Abhängigkeit von präferierten Pfaden zu überprüfen. Als praktisches Beispiel für die Überprüfung wurde der Asse-Vordamm gewählt, für den eine vergleichsweise umfangreiche, weitestgehend veröffentlichte Datenlage zu Verfügung steht. Bei der Überprüfung zeigten sich noch Übertragungsfehler, die korrigiert wurden. Die davon betroffenen Auswertungen werden wiederholt. Die Arbeiten, die den Bezug zu langen Nachweiszeiträumen herstellen wurden fortgesetzt.

AP2A:

Mit der Erfassung des Abfallmengengerüsts von nicht-wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen, bei denen noch nicht abschließend geklärt werden kann, ob sie die Annahmebedingungen für das Endlager Konrad erfüllen, wurde begonnen. Hierbei handelt es sich um graphit-/kohlesteinhaltige Moderator-/Reflektormaterialien aus Forschungs- und Hochtemperaturreaktoren, um abgereichertes Uran aus der Brennelementeherstellung, um Beryllium aus Forschungsreaktoren und um zementierte Wiederaufarbeitungsabfälle von Brennelementen aus Forschungsreaktoren.

AP3: (Thermomechanische Berechnungen)

Keine neuen Untersuchungen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Die Arbeiten zum Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlussbauwerke werden fortgeführt.

AP3: Die Stoffmodellparameter des transienten Materialverhaltens des Steinsalzes sollen bestimmt werden, um verbesserte Aussagen zur Gebrauchstauglichkeit eines offenen Bohrlochs vornehmen zu können.

AP2A: Die Arbeiten zum Abfallmengengerüst von nicht-wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen werden fortgeführt und abgeschlossen. Darüber hinaus soll die Aktualisierung des Mengengerüst und der Kenngrößen für die Wiederaufarbeitungsabfälle und der ausgedienten Brennelemente aus Leistungsreaktoren vorgenommen werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10730
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2010 bis 30.04.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 343.109,00 EUR	Projektleiter: Dr. Franz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Relevante Szenarien und Randbedingungen
- AP2: Laborversuche
- AP3: Stoffgesetze und Modellberechnungen
- AP4: Auswertung und Berichterstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

Der ursprünglich vorgesehene Auspressversuch zur Analyse der auspressbaren Flüssigkeit aus hoch kompaktiertem Salzgrus wurde nach mehrfachen Diskussionen zunächst zugunsten mikrostruktureller Untersuchungen ausgesetzt. Das Versuchskonzept dazu wurde in weiteren Diskussionen entwickelt. Ziel dieser Untersuchungen ist nun eine optische Analyse des Ver-

netzungsgrades der Poren bei unterschiedlichen Kompaktionsgraden bzw. Porositäten. Es soll versucht werden, den Vernetzungsgrad zu visualisieren sowie das Verhältnis von effektiver zu totaler Porosität zustandsabhängig zu quantifizieren. Damit soll untersucht werden, ob die effektive Porosität zu Null wird. Zu diesem Zweck werden mehrere Proben mit Porositäten im Bereich von 10 % bis 1 % hergestellt. Die einzelnen Proben werden nach ihrer Herstellung in einem Exsikator evakuiert und mit einem sehr gering viskosen blauen Harz getränkt. Nach angemessener Verweildauer mit Aushärtung des Harzes werden von jeder Probe Dünnschliffe angefertigt. Die Dünnschliffe werden anschließend unter dem Mikroskop fotografiert. Die erhaltenen Bilder werden einer Bildanalyse dergestalt unterzogen, dass die effektive Porosität aus dem Volumenanteil des blauen Harzes abgeschätzt werden kann.

AP3:

In diesem AP wird u. a. das Kompaktionsverhalten von Salzgrus mit dem Partikel-Flow-Code (PFC) simuliert. Die Simulationstechnik ermöglicht es, Zusammenhänge zwischen mikrostrukturellen Eigenschaften eines Materials und seinen makroskopischen Eigenschaften (z. B. Festigkeit oder Transporteigenschaften) zu erkennen. Die üblicherweise zur Verfügung stehenden Methoden zur Analyse der Geometrieigenschaften (z. B. Porosität) sind nicht ausreichend, um das Modell umfassend zu beschreiben. Es ist daher geplant, die Analyse solcher Partikelmodelle um spezielle Verteilungsfunktionen der statistischen Geometrie zu erweitern. Dazu gehören die Lineare Kontaktverteilungsfunktion, die Sphärische Kontaktverteilungsfunktion, die Paarkorrelationsfunktion und die Ripley's K-Funktion. Mit Hilfe dieser Funktionen lässt sich der Porenraum quantitativ beschreiben. Im Rahmen dieses Vorhabens soll die quantitative Beschreibung des Modellporenraumes mit den Ergebnissen der oben genannten Mikrostrukturuntersuchungen an kompaktiertem Salzgrus verglichen und wenn möglich kalibriert werden. Ein entsprechendes Konzept zur Softwareentwicklung wurde in Zusammenarbeit mit der TU Bergakademie Freiberg entwickelt und ein entsprechender Aufstockungsantrag zur Finanzierung der Arbeiten gestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Bestimmung der zeitabhängigen Randbedingungen (Temperatur-, Spannungs- und Feuchteänderung) für die in AP3 vorgesehenen Modellberechnungen.
- AP2: Verfeinerung des Versuchskonzeptes zur Durchführung der Mikrostrukturellen Untersuchungen und Klärung der versuchstechnischen Machbarkeit mit GRS.
Fortführung der Arbeiten am 3D-Modell, Entwicklung eines vereinfachten semi-analytischen Modells und Planung der Versuchsdurchführung für die mikrostrukturellen Untersuchungen.
- AP3: Die bei DBETEC verwendeten Stoffgesetze zum Versatzverhalten sollen auf ihren Gültigkeitsbereich hinsichtlich Spannung / Kompaktionsgeschwindigkeit, Temperatur, Feuchteinfluss und Porosität überprüft werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10740
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2010 bis 30.04.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.115.960,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kröhn	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Insgesamt fanden im Berichtszeitraum 2 Treffen der Projektpartner zur Steuerung des Gesamtprojekts und zu einzelnen APen statt. Zu AP1 wurde ein Einlagerungshorizont in einem Salzstock definiert, der Grundlage für die im Projekt REPOPERM Phase 2 angestellten Untersuchungen sein soll. Die diesbezügliche Beschreibung soll noch mit den Ergebnissen des Projekts VSG abgeglichen werden.

Mit den noch ausstehenden Versuchen aus AP2 – Langzeitkompaktionsversuch (drei gleiche Probekörper mit unterschiedlicher Anfangsfeuchtigkeit) und Feuchtekompaktionsversuch (drei Probekörper mit unterschiedlicher Vorkompaktion in wechselnd feuchter Atmosphäre) – wurde begonnen. Die Kompaktionsraten werden verfolgt. Wegen geringer Kriechgeschwindigkeit ($<10^{-9}$ 1/s) im Langzeitkompaktionsversuch wurde die angelegte mechanische Spannung planmäßig bereits einmal bzw. zweimal erhöht. Der Exsikkator-Versuch zur Adsorption von Wasser an der Salzoberfläche als Funktion der Luftfeuchtigkeit weist überraschend niedrige Werte auf, so dass die Ergebnisse durch Ungenauigkeiten bei der Wägung sehr stark gestört sind. Dieser un-aufwendige Versuch wird daher noch einmal begonnen.

In einem Modell wurde des Kompaktionsverhaltens von naturtrockenem Salzgrus im Oedometerversuch nachgebildet und die Ergebnisse der numerischen Simulation ausgewählten Messbefunden der BGR gegenüber gestellt. Das Modell lieferte mit den an Bambus II-Experimenten kalibrierten Werten zufriedenstellende Ergebnisse bei der Simulation des mit trockenem Salzgrus durchgeführten Laborversuchs Oedo-97 bei Raumtemperatur.

Ein Vergleich der Berechnungsergebnisse mit den Messergebnissen des Laborversuchs Oedo-99 mit erhöhter Temperatur zeigte im Vergleich erhebliche Defizite im Bereich kleiner Porositäten, welche mit den Projektpartnern diskutiert wurden. Als Ursachen der Abweichungen zwischen Modell und Messung wurden die zahlenmäßige Abbildung von Stempelverschiebungen sowie die modellhafte Beschreibung der Versatzkompaktion (Versatz zu steif im Bereich $\Phi < 5\%$) identifiziert. Die Anwendung der erarbeiteten Modellansätze und Materialparameter bei der Simulation des Kompaktionsverhaltens von Salzgrus unter Feuchteinfluss ergab im Vergleich mit Messbefunden der BGR (Oedo-56) eine Überschätzung des Versatzwiderstandes.

Die bei der Auswertung der Literatur zur Zweiphasenströmung gefundenen Ähnlichkeitsgesetze wurden mit einer Ausnahme für vergleichsweise durchlässige Formationen ($k > 10^{-15}$ m²) hergeleitet. Auch die qualitativ stark unterschiedlichen Ansätze machen noch vor Abschluss der betreffenden Arbeiten bereits deutlich, dass belastbare Modellergebnisse zum Zweiphasenfluss mit Hilfe dieser Ähnlichkeitsbeziehungen nicht erreichbar sind.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschlussarbeiten an einem Ergebnisrapport zu AP1.
- Fortsetzung des Langzeitkompaktionsversuchs und des Feuchtekompaktionsversuchs.
- Fortsetzung der Versuche zur Bestimmung der Adsorptionsisotherme und Auswertung.
- Abschluss der Arbeiten zu den Ähnlichkeitsgesetzen.
- Weiterführende numerische Untersuchungen mit den erarbeiteten Modellansätzen zur trockenen Versatzkompaktion, Ableitung von abgesicherten Materialparametern durch den Vergleich mit den Messbefunden, Übertragung der Modellansätze auf das Kompaktionsverhalten von angefeuchtetem Salzgrus.
- Erstellung eines Modells des GRS-Versuchs zur Langzeitkompaktion.
- Erstellung eines vereinfachten THM-Modells für die Ausbreitung von Lösung in den Richtstrecken auf der Basis der Ergebnisse aus AP1 und AP3 und Beginn der Rechnungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10750
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 31.01.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 270.970,00 EUR	Projektleiter: Dr. Wolf	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Ausgangsdaten und Sicherheitsnachweiskonzept

AP2: Begleitung und Optimierung der weiterführenden Erkundungsarbeiten

AP3: Auswertung der neuen Erkundungsergebnisse

AP4: Optimierung des Endlagerkonzeptes

AP5: Präzisierung des sicherheitsanalytischen Modells und Bewertung möglicher radiologischer Konsequenzen

AP6: Vorläufige Bewertung der Robustheit und Sicherheit des Endlagersystems

AP7: Projektkoordination

Die GRS ist beteiligt an den Arbeitspaketen 5 und 6.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im ersten Halbjahr 2011 fanden zwei Projekttreffen statt:

09.03.2011: Vorbereitung 3. gemeinsames Projekttreffen (DBE TECHNOLOGY in Peine)
23.-26.03.2011: 3. Projekttreffen mit VNIPI PT in Moskau

AP5: Auf der Grundlage des von VNIPI PT erstellten Endlagerkonzepts wurden erste vorläufige Rechnungen zur Ausbreitung von Radionukliden durchgeführt und auf dem Projekttreffen im März in Moskau vorgestellt. Bei diesem Treffen wurden auf der Grundlage neuer Erkundungsergebnisse einige Eingangsdaten für die Modellierung neu bewertet. Des Weiteren wurde für die aus dem Endlager freigesetzten Radionuklide eine Transferfunktion in die Biosphäre abgeleitet. Die Modellierung der Radionuklidausbreitung wurde im Nachgang an dieses Treffen entsprechend aktualisiert und die aktualisierten Rechenergebnisse den Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

Das Konzept zur hydrogeologischen Modellierung des Untersuchungsgebietes wurde ebenfalls aktualisiert und anschließend in das Programm d³f umgesetzt.

AP6: Es wurde eine Literaturrecherche über Sicherheitsbewertungen von Endlagern in magmatischen Gesteinen in anderen Ländern (insbesondere Finnland, Schweden, Schweiz) hinsichtlich der eingesetzten Modelle und Parameter sowie den verwendeten Parameterverteilungen durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP5 und AP6: Auf der Grundlage der Ergebnisse der durchgeführten deterministischen Rechnungen und der Auswertungen von Literatur zu Sicherheitsbewertungen von Endlagern in magmatischen Gesteinen werden Verteilungen für die sich als sensitiv herausgestellten Parameter abgeleitet. Die Verteilungen werden auf dem nächsten Projekttreffen in Peine Ende September vorgestellt und diskutiert. Im Nachgang dieses Treffens werden die Verteilungen zur Durchführung probabilistischer Rechenläufe eingesetzt. Durch diese Rechnungen sollen Aussagen über die Robustheit der Sicherheitsfunktionen gewonnen und damit Konsequenzen für die Langzeitsicherheit abgeschätzt werden.

Die Modellierung der Grundwasserströmung in d³f wird durchgeführt und die Ergebnisse auf dem nächsten Projekttreffen vorgestellt und diskutiert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10760
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 31.01.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 506.233,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krone	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1 und AP4:

Seitens des russischen Projektpartners wurde nochmals ein überarbeitetes Konzept bezüglich der geometrischen Situation der untertägigen Anlagen übergeben. Basierend auf diesen Daten wurden erneut dreidimensionale thermische Berechnungen durchgeführt, um die thermische Belastung sowohl der geotechnischen Barriere Bentonit als auch des Wirtsgesteins als Folge der Behälterwärme bewerten zu können. Von russischer Seite wurden dazu auch Bewertungskriterien geliefert, insbesondere Grenztemperaturen, die im Bergwerk an den Hohlraumkonturen nicht überschritten werden sollen. Dies sind: (i) die Temperatur des Wirtsgesteins soll eine Temperatur von 80 °C nicht überschreiten, (ii) die Temperatur an der Erdoberfläche (-20 m) soll sich um nicht mehr als 2 °C erhöhen, (iii) die Temperaturen an der Kontur der Einlagerungsstrecken soll zu keiner Zeit mehr als 25 °C betragen und (iv) die Temperatur des Bentonitbuffers soll 100 °C nicht überschreiten. Die Berechnungsergebnisse zeigen, dass alle thermischen Grenzkriterien eingehalten werden. Die Ergebnisse wurden in einem „Technical Report“ in englischer Sprache dokumentiert und dem russischen Partner übergeben.

Am 14. und 15. April 2011 fand ein deutsch-russischer Workshop in St. Petersburg statt. Im Zuge dieses Workshops wurden seitens des russischen Projektpartners VNIPI PT inhaltliche Fragen und Kommentare zu dem von deutscher Seite übergebenen ersten Ergebnisbericht bezüglich der thermischen Entwicklung des geplanten Endlagers formuliert. Im Ergebnis der Fachdiskussion wurden weitere Berechnungsaufgaben formuliert, um die modellhafte thermische Entwicklung des geplanten Endlagers weiter zu präzisieren und zu verdeutlichen. Nach Durchführung dieser Berechnungen zeigen auch diese Ergebnisse, dass die vorgegebenen Grenztemperaturen an keiner Stelle überschritten werden. Ein diesbezüglicher Kurzbericht wurde dem russischen Partner in englischer Sprache übergeben.

AP7:

Im Rahmen der Projektkoordination erfolgte die Vorbereitung des deutsch-russischen Workshops in St. Petersburg zur Entsorgung schwach- und mittelaktiver Abfälle und zur Endlagerung in Tonsteinformationen sowie des Expertentreffens von BMWi und Rosatom am 30.06. und 01.07.2011 in München.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP4:

- Numerische Simulation der Streckenauffahrung im Bereich des geplanten untertägigen Endlagers und Ermittlung der Ausdehnung der Auflockerungszone (EDZ) an einem ausgewählten Beispiel.
- Simulation der Temperatursausbreitung und beispielhafte Charakterisierung des thermo-mechanischen Einflusses auf die bestehende Auflockerungszone.
- Simulation eines Erdbebens induzierten Erschütterung des Gebirges im Bereich einer aufgefahrenen Strecke und Charakterisierung des Einflusses auf die Auflockerungszone.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10770
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.06.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 598.885,00 EUR	Projektleiter: Dr. Bischofer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das primäre Ziel von VESPA ist es, Konservativitäten in den Annahmen, die für die Radionuklide ^{14}C , ^{79}Se , ^{129}I und ^{99}TC in Langzeitsicherheitsnachweisen z. Z. angenommen werden, abzubauen.

Ziel des GRS-Teilprojekts VESPA ist es, thermodynamische Daten für I, Se und Cs in hochsalinaren Lösungen des Systems Na, K, Mg, Ca – Cl, SO_4 – H_2O bei Temperaturen von 25 – 90 °C zu bestimmen.

Des Weiteren werden Löslichkeitskonstanten von LDH-Verbindungen (Layered Double Hydroxides) in endlagerrelevanten Lösungen bestimmt sowie der aktuelle Wissensstand zu Spalt- und Aktivierungsprodukten dargestellt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Literaturstudien

AP2: Bestimmung thermodynamischer Daten

AP3: Eingabe thermodynamischer Daten in die Referenzdatenbasis THEREDA

AP4: Vergleichsrechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis

AP5: Zusammenfassender Bericht zum Wissensstand über die Rückhaltung Spalt- und Aktivierungsprodukte

AP6: Koordination des Verbundvorhabens

AP7: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Literaturstudien zu Iod, Selen und Cäsium sowie der Überblick über ^{36}Cl wurden überarbeitet und abschließend fertig gestellt.

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Es wurden Vortests zur Umwandlung von Iodid zu Iod und Iodat bzw. von Selenit zu Selenat bei Durchführung der isopiesticen Versuche unter Sauerstoffatmosphäre erledigt. Erste Daten für die binären Systeme $\text{CsCl-H}_2\text{O}$, $\text{CsSO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{NaI-H}_2\text{O}$, $\text{KI-H}_2\text{O}$ wurden isopiestic bestimmt.

Eine Dampfdruckmesseinrichtung wurde entwickelt, die die isopiesticen Versuche unterstützen soll.

Eine Messzelle zur potentiometrischen Bestimmung des Aktivitätskoeffizienten der Hydrogenselenite wurde bereits aufgebaut.

Zusammenfassender Bericht zum Wissensstand:

Es wurde ein gemeinsamer Literaturbericht mit den Literaturstudien aller Verbundpartner zum 3. Projekt-Treffen erstellt.

Koordination des Verbundvorhabens:

Das 2. Projekt-Treffen zum Verbundvorhaben im Januar 2011 wurde organisiert und nachbereitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Literaturstudien:

Die ergänzende Literaturstudie zu ^{14}C wird überarbeitet und abschließend fertig gestellt.

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Aufbau der Dampfdruckmesseinrichtung und Testung derselben (Dichtigkeit, Nachfahren der Wasserdampfdruckkurve).

Vortests zur Oxidationsempfindlichkeit von MgI- und CaI- Lösungen.

Isopiestic Messungen für die binären Systeme $\text{CsCl-H}_2\text{O}$, $\text{CsSO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{NaI-H}_2\text{O}$, $\text{KI-H}_2\text{O}$, $\text{Mg}_2\text{I-H}_2\text{O}$, $\text{Ca}_2\text{I-H}_2\text{O}$ bei 40, 60 und 90 °C.

Vortests mit Hydrogenseleniten sowie nach Möglichkeit bereits Durchführung erster Messungen zur potentiometrischen Bestimmung thermodynamischer Daten.

Koordination des Verbundvorhabens:

Vor- und Nachbereitung des 3. Projekttreffens im Juli 2011 zum Verbundvorhaben VESPA.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 E 10780
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.06.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 217.340,00 EUR	Projektleiter: Dr. Curtius	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Langlebige Spalt- und Aktivierungsprodukte ^{14}C , ^{36}Cl , ^{79}Se , ^{129}I , ^{135}Cs und ^{99}Tc besitzen eine hohe Mobilität, wenn sie in anionischer Form vorliegen. Ihr Beitrag zur Dosisbelastung in Langzeitsicherheitsberechnungen wird bislang überkonservativ abgeschätzt, da die Rückhalteprozesse im Nahfeldbereich in den Endlagerbarrieren ungenügend bekannt sind. Eine Korrektur dieser überkonservativen Abschätzung wird als Arbeitsziel angestrebt, indem experimentell die Rückhaltekapazitäten der in anionischer Form vorliegenden Radioisotope ^{75}Se , ^{129}I , ^{99}Tc an lamellaren Doppelhydroxid-Verbindungen (LDH), die als Endlagerbarriere vorhanden sind, ermittelt werden sollen.

Folgende Teilziele wurden definiert.

- Synthese und Identifizierung von Mischkristall-LDH-Verbindungen (partieller Austausch des zweiwertigen Magnesiums gegen zweiwertiges Cobalt, Eisen und Nickel).
- Zusammenfassung des aktuellen Wissensstandes zur Rückhaltung von Selenit, Iodid und Pertechetat an LDH-Verbindungen und
- Untersuchungen zur Rückhaltung der anionischen Radionuklidspezies (Selenit, Iodid und Pertechetat) an den synthetisierten Mischkristall-LDH-Verbindungen

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Synthese und Charakterisierung von modifizierten LDHs.

AP2: Literaturstudie zur Rückhaltung anionischer Spezies an LDH-Verbindungen.

AP3: Rückhaltung anionischer Radionuklidspezies an den modifizierten LDHs

AP4: Ergebnisdokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Ausgehend von Mg-Al-LDH Verbindungen, die Chloridionen und Wasser in der Zwischenschicht besitzen, konnten erfolgreich LDH-Mischkristallverbindungen hergestellt werden, in denen partiell das divalente Magnesium gegen divalentes Eisen, Cobalt und Nickel ausgetauscht wurde. Alle Mischphasen sind aufgrund der Ergebnisse der Röntgenbeugung als phasenrein zu bezeichnen, d. h. es lagen keine kristallinen Nebenprodukte vor. Weitere Charakterisierungen mittels TGA, FT-IR, BET, REM-EDX und ICP-OES wurden durchgeführt.

AP2: Die Ergebnisse der durchgeführten Literaturstudie wurden während des Verbundtreffens im Januar in Karlsruhe vorgestellt. Gewünschte Ergänzungen wurden eingearbeitet und die überarbeitete Version an den Koordinator des Verbundprojektes übermittelt.

AP3: Noch nicht begonnen.

AP4: Noch nicht begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die synthetisierten LDH-Mischphasen werden zur strukturellen Charakterisierung mittels EXAFS (KIT-INE) und zur Bestimmung der Löslichkeitskonstanten (GRS-Braunschweig) für den Transport vorbereitet.

AP2: Die Arbeiten sind abgeschlossen.

AP3: Batch-Adsorptionsuntersuchungen an den synthetisierten LDH-Mischkristallphasen mit Iodid und Pertechnetat in Wasser, in Tonporenwasser (Mont-Terri Typ A1) und in Salzlauge (MgCl₂-reiche Lauge) werden gestartet. Die Adsorption soll als Funktion der Zeit, des pH-Wertes und der Radionuklidkonzentration untersucht werden.

AP4: Beginn der Arbeiten im 2. Halbjahr 2012 geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10790
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.06.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 305.803,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brendler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Primäres Ziel des Verbundprojektes VESPA mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, des Karlsruhe Institut für Technologie und des Forschungszentrums Jülich ist es, Konservativitäten in den Annahmen, die für die Radionuklide ^{14}C , ^{79}Se , ^{129}I und ^{99}Tc in Langzeitsicherheitsnachweise, z. Z. angenommen werden, abzubauen. Ziel des Teilvorhabens des HZDR ist die Identifikation von Rückhalteprozessen für das Spaltprodukt ^{79}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 RES³T eingebunden. Die Untersuchungen konzentrieren sich auf die Randbedingungen in den Wirtsgesteinen Salz und Ton, der Temperaturbereich umfasst 25 °C bis 90 °C.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Literaturrecherche
(aktueller Stand zur Se Geochemie)
- AP2: Komplexierung bei höheren Temperaturen
(Komplexbildung von Se mit kationischen Liganden bei $T > 25$ °C)
- AP3: Sorptionsversuche
(Batchversuche von Se an Alumosilikaten bei höheren Temperaturen, Feststoffanalyse der Sorbentien, spektroskopische Untersuchung der Oberflächenspezies)
- AP4: Modellierung und Datenbewertung
(Bestimmung thermodynamischer Daten, Einbindung in Datenbanken THEREDA und RES³T)
- AP5: Dokumentation
(Projektabschlussbericht)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

- Bericht zur Literaturrecherche und Datenbewertung wurde erstellt.

AP2:

- Bereitstellung des notwendigen instrumentellen Versuchsaufbaus für Untersuchungen bei hohen Temperaturen und unter reduzierenden Bedingungen

AP3:

- Batchexperimente
 - Sorption von Se(VI) und Se(IV) an Modeloxiden (TiO_2 , $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) bei 25 °C und moderaten Ionenstärken (NaCl)
 - Sorption von Se(VI) an TiO_2 bei hohen Temperaturen (60 °C) und moderaten Ionenstärken (NaCl)
 - Sorption von Se(VI) bei hohen Ionenstärken (bis zu 6 mol/L NaCl)
 - Sorption von Se(VI) an TiO_2 bei unterschiedlichen Hintergrundelektrolyten (NaCl, KCl, MgCl_2 , CaCl_2 , NaClO_4) (bis I=1 mol/L)
- ATR FT-IR Spektroskopie
 - Sorptionsversuche von Se(VI) an TiO_2 bei verschiedenen Ionenstärken und verschiedenen Hintergrundelektrolyten (NaCl, KCl, MgCl_2 , CaCl_2 , NaClO_4) (bis I=1 mol/L; bei NaCl: bis I=4 mol/L)
 - Sorptionsversuche von Se(VI) an TiO_2 bei verschiedenen Temperaturen (25 °C, 40 °C, 50 °C, 60 °C)

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2:

- Start der Untersuchungen zur Komplexbildung von Se mit den kationischen Liganden Calcium, Magnesium und Eisen
 - Für alle Oxidationszustände
 - Bei hohen Temperaturen (40 und 60 °C)
 - Bei hohen Ionenstärken (bis zu 6 M)
 - Als Methoden: potentiometrische Titration und ATR FT-IR Spektroskopie

AP3:

- Start der Untersuchungen zur Oberflächenkomplexbildung von Se bei höheren Temperaturen (40 und 60 °C) und Ionenstärken bei weiteren Modeloxiden und Alumosilikaten
- Batchexperimente und spektroskopische Untersuchung der Oberflächen

AP4:

- Bestimmung erster thermodynamischer Parameter

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10800
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.06.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 615.228,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Geckeis	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Qualität von Langzeitsicherheitsnachweisen für Endlager radioaktiver Abfälle hängt stark von dem wissenschaftlichen Verständnis der stattfindenden Prozesse, der Qualität verwendeter Datenbasen sowie von deren konzeptioneller und mathematischer Umsetzung in Modellen ab. Ein weitgehend standortunabhängiger Forschungsbedarf besteht für geochemische Daten und Werkzeuge bezüglich der mobilen Spalt- und Aktivierungsprodukte und deren Rückhalteprozesse in den Endlagerbarrieren, wie z. B. Thermodynamik und Sorption bei höheren Temperaturen und zu Rückhalteprozessen durch Mineralisation, d. h. durch den Einbau in neu gebildete Mineralphasen. Diese Daten wurden für deutsche Endlagerkonzepte bisher unzureichend ermittelt. Im Falle eines Vergleichs von Tonsteinstandorten haben diese Forschungsarbeiten eine entscheidende Bedeutung: Die Ergebnisse erlauben die Ableitung der Größe des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs. Die langlebigen Spalt-nuklide ^{79}Se und ^{99}Tc gelten in vielen Langzeitsicherheitsrechnungen zu Endlagern für radioaktive Abfälle als dosisbestimmend. Ein Grund für diese Einschätzung ist die Tatsache, dass beide Nuklide anionische Spezies bilden können, die nur geringe Sorption an Mineralphasen eingehen und bei denen die Löslichkeit relevanter Festphasen i. allg. sehr hoch liegt. Im Falle von ^{99}Tc gilt dies allerdings nur für oxidierende Bedingungen, unter denen sich TcO_4^- bildet. Die Arbeiten zur Ermittlung belastbarer Daten zur Redoxchemie des Tc sind daher geeignet, überkonservative Annahmen bzgl. der Tc-Mobilität zu vermeiden. Se bildet auch unter reduzierenden Bedingungen anionische Spezies wie Se^{2-} , Se_2^{2-} und SeO_3^{2-} , für die ähnliches gilt wie für TcO_4^- . Für alle anionischen Se-Spezies ist bekannt, dass sich feste Lösungen mit Mineralphasen wie Pyrit bzw. Calcit bilden können. Für die Radionuklidrückhaltung durch Bildung fester Lösungen existieren jedoch nur wenige belastbare Daten, die im Rahmen des Projekts erarbeitet werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP0: Dokumentation des State-of-the-Art
- AP1: Aquatische Chemie und Thermodynamik von Tc(IV)
- AP2: Reduktionschemie von Tc(VII) / Tc(IV) in verschiedenen Medien
- AP3: Einfluss der Reduktionskinetik auf die Tc-Migration in natürlichen Systemen
- AP4: Struktureller Einbau von Selen in Mineralphasen (Pyrit, Calcit)
- AP5: Dokumentation und Publikation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP0 - Status: Die Literaturstudie zum State-of-the-Art bezüglich der aquatischen Chemie und Thermodynamik von Tc(IV), der Reduktionschemie von Tc(VII)/Tc(IV) in verschiedenen Medien, zum Einfluss der Reduktionskinetik auf die Tc-Migration in natürlichen Systemen sowie zum strukturellen Einbau von Selen in Mineralphasen (Pyrit, Calcit) wurde entsprechend der Festlegung beim Projektmeeting im Januar 2011 überarbeitet und an

GRS weitergeleitet. Es wurde ein neues Kapitel zur Relevanz der geplanten Untersuchungen von KIT-INE für die Sicherheit potentieller Endlager ergänzt.

AP1 - Status: Die Löslichkeitsexperimente mit Tc(IV) in verdünnten NaCl Lösungen wurden fortgeführt und liefern Hinweise auf eine starke Abhängigkeit der Löslichkeit von der Methode der Festphasenpräparation. Die Experimente in verdünnten bis konzentrierten CaCl₂ Lösungen zeigen keine signifikante Löslichkeitserhöhung im stark alkalischen Bereich. Dieses weist entweder auf eine geringe Tendenz zur Ausbildung ternärer Ca-Tc(IV)-OH Komplexe oder auf eine Festphasenumwandlung hin. Die ausgeschriebene Doktorandenstelle im Rahmen von VESPA konnte mit Frau E. Yalcintas (Beginn zum 1. Aug. 2011) besetzt werden.

AP2 - Status: Die Untersuchung von Tc-Redoxprozessen im Rahmen des Eh/pH-Konzepts wurde auf zusätzliche Redoxsysteme ausgedehnt und im Berichtszeitraum für das 0.1 M NaCl System weitgehend abgeschlossen. Der Vergleich der experimentellen Daten mit thermodynamischen Modellrechnungen anhand der NEA Datenbasis zeigt gute Übereinstimmung. Tc-Redoxprozesse können unter den gegebenen Bedingungen anhand der Eh/pH Bedingungen eingeschätzt werden. Ergebnisse aus AP2 wurden von Dr. Kobayashi bei der Tagung „7th International Symposium on Tc and Rhenium – Science and Utilization“ (4-8 July, Moscow, Russia) vorgetragen.

AP3 - Status: Die experimentellen Studien zur Tc(VII) Reduktion in Anwesenheit von Kluftfüllmaterial (Äspö & Grimsel) wurden fortgeführt. Innerhalb der ersten 42d Kontaktzeit konnte weder Kolloid-assoziiertes Tc noch ein Unterschied im Sorptionsverhalten der beiden Materialien festgestellt werden. Nach 312d Kontaktzeit ist eine Tc- Konzentrationsabnahme in der Kontaktlösung beobachtbar, die auf Grund der sich einstellenden pe/pH Bedingungen eine Tc(VII) Reduktion andeutet. In ersten Migrationsstudien mit kurzen Verweilzeiten von ~1 h in natürlichen Äspö Bohrkernen konnten hohe Wiedererhalte (~100 %) in Einklang mit den Beobachtungen der Batchexperimente detektiert werden. Vergleichende Untersuchungen an gemahlene Tonproben (OPA & COx) zeigen eine starke Abhängigkeit der Sorption (K_d) in beiden Systemen von der Kontaktzeit und über 40 % OPA/COx-assoziiertes Tc nach 4 Monaten (S/L: 10-200). Erste Kurzzeit-Proben wurden mit XPS und XAFS analysiert, die Messungen von Langzeitproben erfolgt im nächsten Zwischenberichtszeitraum. Eine Doktorandenstelle zu diesem Arbeitspaket wird zum 1. Oktober mit Herrn Yury Totstkiy besetzt werden.

AP4 - Status: Copräzipitationsversuche in Durchflussreaktoren (MFR) zeigen, dass bei sehr niedrigen Se Konzentrationen ($10^{-13} - 10^{-7}$ mol/L) Se(IV) bevorzugt in Calcit eingebaut wird. Der empirische Henderson-Kracek Verteilungskoeffizient liegt bei Werten von 6 – 21. Das Ausmaß des Se(IV) Einbaus ist größer als thermodynamisch erwartet, was auf die Durchführung der MFR-Versuche bei übersättigten Bedingungen zurückzuführen ist. EXAFS Messungen bestätigen, dass Se(IV)O₃²⁻ in der Calcitstruktur Carbonat substituiert. In Selenid-dotiertem Mackinawit befindet sich Se auf Gitterplätzen des Schwefels. Diese Aussage wird durch zusätzliche EXAFS Daten gestützt. REM Aufnahmen zeigen keinen wesentlichen Einfluss von Se auf die Partikelmorphologie und keine separate Se-Phase Ausfällung. Durch Kontakt mit FeS in Suspension wird Selenid teilweise oxidiert und zurückgehalten. Es entsteht eine Mischung aus Eisenselenid und Se(0). Inwiefern eine Umwandlung von FeS in Pyrit erfolgt, wird noch überprüft.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weiterführung der laufenden Löslichkeitsexperimente in NaCl. Identifikation relevanter Tc(IV) Festphasen im CaCl₂ System.
- AP2: Präsentation der Arbeiten von Dr. Kobayashi im Rahmen eines Vortrags bei der „Migration 2011“ Konferenz (18.-23. Sept. 2011, Beijing, China). Arbeiten zur Redoxmessung in salinaren Systemen und Durchführung von analog konzipierten Tc-Redoxexperimenten (Eh/pH) unter hochsalinaren Bedingungen.
- AP3: Im Rahmen des CP CROCK steht neues unter anoxischen Bedingungen gebohrtes Kluftfüllmaterial aus Äspö (Schweden) zur Verfügung. Neue vergleichende Batch-Experimente werden angesetzt, um die Tc(VII) Reduktion zu quantifizieren.
- AP4: Durchflussreaktorversuche werden zur Untersuchung der Se(VI)-Calcit Wechselwirkung durchgeführt. Batch Sorptionsversuche und weitere EXAFS/GIXAFS Messungen an der Calcitoberfläche sollen die Se(IV/VI)-Speziation unter Calcit-Gleichgewichts-Bedingungen aufklären. Die Umwandlung von Mackinawit in Pyrit soll mit reinem FeS und mit Selenid-dotiertem Mackinawit untersucht werden. XRD und REM Messungen sollen zeigen, ob Se die Synthese beeinflusst und ob sich eine separate Se-Phase bildet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 10810
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.01.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 306.437,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hampel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Im Berichtszeitraum führte der Zuwendungsempfänger mit der zum Vorhabensbeginn beschafften Version FLAC3D-4.0 umfangreiche Testrechnungen durch, da sich in ersten Modellberechnungen mit der neuen Programmversion zum Teil widersprüchliche Ergebnisse gezeigt hatten. Durch eine grundlegende Überarbeitung der C++-Implementation des CDM in FLAC3D konnten die Schwierigkeiten behoben und wesentliche Verbesserungen der numerischen Stabilität und Effizienz der Berechnungen erreicht werden, so dass nun die Grundlage für eine erfolgreiche Durchführung der im Vorhaben geplanten Modellberechnungen geschaffen ist.

Im Berichtszeitraum führten die Partner zwei Projekt-Workshops durch: am 09.-10. Februar in Karlsruhe (veranstaltet vom KIT) und am 23.-24. Mai 2011 in Bingen am Rhein (veranstaltet vom Zuwendungsempfänger). Auf den Workshops wurden erste Berechnungsergebnisse zu den gemeinsam vereinbarten und von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen vorgestellt und besprochen. Außerdem wurden Labor- und In-situ-Daten sowie Modellansätze zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz diskutiert und die Rahmenbedingungen für weitere Modellberechnungen gemeinsam festgelegt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird als Nächstes seine Modellberechnungen zur Bohrlochkonvergenz ohne und mit Erhitzereinfluss durchführen und auswerten. Außerdem wird er den für den 20.-21. September bei der TU Clausthal geplanten vierten Projektworkshop vorbereiten und gemeinsam mit den Partnern durchführen. Ferner ist das Verfassen von Veröffentlichungen zum Verbundprojekt und zum CDM-Stoffgesetz geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zum CDM-Stoffgesetz und zu den vorlaufenden Verbundprojekten:

Hampel, A. & O. Schulze (2007): The Composite Dilatancy Model: A constitutive model for the mechanical behavior of rock salt. In: K.-H. Lux, W. Minkley, M. Wallner & H.R. Hardy, Jr. (Hrsg.): Basic and Applied Salt Mechanics; Proc. Sixth Conf. on the Mechanical Behavior of Salt (Saltmech 6), Hannover, Mai 2007, Taylor & Francis (A. A. Balkema Publ.), Lisse.

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

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

Hampel, A., R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, K. Staudtmeister, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, K.-H. Lux, O. Schulze, U. Heemann, U. Hunsche (2010): Benchmarking of Geomechanical Constitutive Models for Rock Salt. In: Proc. 44th US Rock Mechanics Symposium (ARMA 2010), Salt Lake City/Utah/USA, 27.-30.06.2010, American Rock Mechanics Association (ARMA).

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 10820
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 30.09.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 327.925,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung

AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum führten die Projektpartner zwei Projekt-Workshops durch: am 09.-10. Februar in Karlsruhe (veranstaltet vom KIT) sowie am 23.-24. Mai 2011 in Bingen am Rhein (veranstaltet von Herrn Dr. Hampel).

Auf dem Workshop in Karlsruhe stellte der Zuwendungsempfänger seine Vorschläge zu den Versuchsdurchführungen für die im Vorhaben geplanten laborativen Untersuchungen vor, die anschließend unter den Partnern diskutiert wurden. Zuvor wurden Versuchsdaten von bereits im Vorfeld dieses Vorhabens durchgeführten Laborversuchen aufbereitet und an die anderen Projektpartner per Email verschickt.

Auf dem Workshop in Bingen wurden von den Partnern Simulationsergebnisse von thermo-mechanischen Berechnungen vorgestellt und diskutiert. Grundlage dieser simulierten Re-Analysen sind die In-situ-Messdaten der niederländischen Energy Research Foundation (ECN) über Bohrlochkonvergenzmessungen in der Schachanlage Asse II in den 80er Jahren. Diesbezüglich präsentierte der Zuwendungsempfänger simulierte Re-Analysen zu den vereinbarten Versuchen IFC (freie Bohrlochkonvergenz) und HFCP (freie Bohrlochkonvergenz mit Erhitzer) sowie zusätzlich den so genannten Versuch HPP (behinderte Bohrlochkonvergenz mit Spannungsentwicklung unter Erhitzereinwirkung). Außerdem stellte der Zuwendungsempfänger auf dem zweiten Workshop sein aktuelles Stoffmodell zur Schädigungsrückbildung vor.

Von den vereinbarten Laborversuchen wurden beim Zuwendungsempfänger Mitte Mai zwei Laborversuche gestartet. Zum einen ein mehrstufiger Versuch mit 2 Stufen unter und einer Stufe über der Dilatanzgrenze, in der eine Schädigung im Prüfkörper generiert werden soll, sowie einer anschließenden Verheilungsphase. Beim zweiten Versuch steht die temperaturabhängige Verheilung im Vordergrund, so dass einer kurzen Schädigungsphase eine Verheilungsphase folgt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird die numerischen Simulationen weiterführen sowie das geplante laborative Versuchsprogramm zur Verheilung. Erste Versuchsergebnisse werden voraussichtlich auf dem nächsten Workshop präsentiert werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

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

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 10830
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 30.09.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 316.242,00 EUR	Projektleiter: Dr. Salzer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum führten die Partner zwei Projekt-Workshops durch: am 09.-10. Februar in Karlsruhe (veranstaltet vom KIT) und am 23.-24. Mai 2011 in Bingen am Rhein (veranstaltet von Dr. Hampel). Auf den Workshops wurden erste Berechnungsergebnisse zu den gemeinsam vereinbarten und von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen vorgestellt und besprochen. Außerdem wurden Labor- und In-situ-Daten sowie Modellansätze zum thermomechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz diskutiert und die Rahmenbedingungen für weitere Modellberechnungen gemeinsam festgelegt.

Das vorliegende Teilvorhaben 2 beteiligt sich mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach Minkley und dem Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz nach Günther/Salzer am Stoffgesetzvergleich und verwendet das Programm FLAC3D (Fa. Itasca). Außerdem ist es maßgeblich an der Durchführung der Laborversuche zur Ableitung der Stoffmodellparameter beteiligt.

Im Berichtszeitraum hat das IfG die Planung der Laborversuche mit den Partner abgestimmt, die Prüfkörper für die Kriechversuche beschafft und hergestellt sowie 10 Kriechversuche begonnen.

Die Benchmark-Berechnungen zu den Bohrlochversuchen mit und ohne Erhitzer wurden zunächst mit dem Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz nach Günther/Salzer durchgeführt, wozu eine Programmmodifikation zur Berücksichtigung der Spannungsabhängigkeit der stationären Kriechrate und des Temperatureinflusses implementiert und getestet wurde. Mit diesen Berechnungen wurde eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Werten erzielt. Außerdem wurde für die zukünftigen Berechnungen zum Dammjoch in diesen Stoffansatz eine Programmmodifikation zur Berücksichtigung der Verheilung implementiert und an den von TUC zur Verfügung gestellten Verheilungsversuchen verifiziert. Diese Arbeiten wurden auf dem dritten Projektworkshop am 23. Und 24. Mai in Bingen den Partner vorgestellt und diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das IfG wird als Nächstes die thermomechanischen Modellparameter des visko-elasto-plastischen Stoffmodells nach MINKLEY für die Benchmark-Berechnungen zur freien Bohrlochkonvergenz mit und ohne Erhitzer ableiten und den in den Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz eingefügten Modul zur Berücksichtigung der Verheilung implementieren und testen. Außerdem wird es den vierten Projektworkshop gemeinsam mit den Partnern am 20. und 21. September 2011 beim TUC in Clausthal durchführen. Ferner ist das Verfassen von Veröffentlichungen zum Verbundprojekt und zum CDM-Stoffgesetz geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zu dem IfG-Stoffgesetz und zu den vorlaufenden Verbundprojekten:

Günther, R.-M., Salzer, K. and Popp, T. (2010): Advanced Strain – Hardening Approach Constitutive model for rock salt describing transient, stationary, and accelerated creep and dilatancy. 44th US Rock Mechanics Symposium and 5th U.S.-Canada Rock Mechanics Symposium, Salt Lake City, UT June 27–30, 2010

Hampel, A., Günther, R.-M., Salzer, K., Minkley, W., Pudewills, A., Leuger, B., Zapf, D., Staudtmeister, K., Rokahr, R., Herchen, K., Wolters, R., Lux, K.-H., Schulze, O., Heemann, U. and Hunsche, U. (2010): Benchmarking of Geomechanical Constitutive Models for Rock Salt. 44th US Rock Mechanics Symposium and 5th U.S.-Canada Rock Mechanics Symposium, Salt Lake City, UT June 27–30, 2010

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10840
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 30.09.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 159.370,00 EUR	Projektleiter: Pudewills	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

An dem aktuellen Verbundprojekt -Stoffgesetzvergleich- beteiligt sich das INE mit dem im Rahmen des ersten Verbundprojekts entwickelten Stoffmodell und verwendet primär für die Modellberechnungen des Gebirgsausschnittes der Grube Angersdorf das Finite-Element Programmsystem ADINA. Im Berichtszeitraum wurden die folgenden Arbeiten durchgeführt:

- Numerische Simulation des IFC Versuchs (Isothermal Free Convergence). Bei diesem In-situ-Versuch wurde die Konvergenz des 300 m-Bohrlochs über einen Zeitraum von 1200 Tagen gemessen. Die Rechnungen wurden unter der Annahme eines litostatischen Druckes von 21 MPa bzw. 24 MPa durchgeführt und mit Stoffkennwerten für Steinsalz, die bei den früheren Nachrechnungen der EU-Strecke in Sondershausen verwendet wurden. Die großen Unterschiede zwischen den Rechenergebnissen und In-situ-Messungen zeigen, dass die vorhandenen Kriechdaten an Asse-Steinsalz-Messungen neu angepasst werden müssen. Nach dieser Anpassung der Rechenergebnisse für einen Gebirgsdruck von 24 MPa wurde eine Parameterstudie durchgeführt. Die Empfindlichkeit der Konvergenzen auf die Stoffparameter und den Gebirgsdruck wurde untersucht.
- Im Berichtszeitraum führten die Partner zwei Projekt-Workshops durch: Am 09. - 10. Februar in Karlsruhe und am 23. - 24. Mai 2011 in Bingen am Rhein. Auf den Workshops wurden erste Berechnungsergebnisse zu den gemeinsam vereinbarten und von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen vorgestellt und besprochen, weiterhin wurden Labor- und In-situ-Daten sowie Modellansätze zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz diskutiert. Im Detail wurden die Randbedingungen der thermomechanischen Berechnungen eines Erhitzerversuchs HFCP (Heated Free Convergence Probe in der Schachanlage Asse II) festgelegt. Die Berechnung der Temperaturentwicklung sowie die thermisch induzierten Bohrlochkonvergenzen wurden durchgeführt. Die Sensitivität der Rechenergebnisse gegenüber den verwendeten Stoffgesetzen und dem Gebirgsdruck wurde auch hier untersucht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird als Nächstes die Auswertung der bisherigen Rechenergebnisse zur Simulation des HFCP-Versuchs und im Rahmen des nächsten Projektworkshops (20.-21. September bei der TU Clausthal) präsentieren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Pudewills, A. (2007): BMBF-Verbundprojekt Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen, Wissenschaftliche Berichte, FZKA-7314, Juni 2007. Hampel, A., R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh (2010): Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1577-1617), Karlsruher Institut für Technologie, Projektträger PTKA-WTE.

Hampel, A., R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, K. Staudtmeister, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, K.-H. Lux, O. Schulze, U. Heemann, U. Hunsche (2010): Benchmarking of Geomechanical Constitutive Models for Rock Salt. In: Proc. 44th US Rock Mechanics Symposium (ARMA 2010), Salt Lake City/Utah/USA, 27.-30.06.2010, American Rock Mechanics Association (ARMA).

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 10850
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 30.09.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 198.242,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Rokahr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die ersten Berechnungen zur Bohrlochkonvergenz wurden durchgeführt und beim 2. Projektworkshop am 09. und 10. Februar 2011 beim KIT in Karlsruhe vorgestellt und mit den Berechnungen der Projektpartner verglichen und diskutiert. Außerdem wurden weitere Berechnungen besprochen. Diese beinhalten Berechnungen der Bohrlochkonvergenz (ECN), in denen zum einen die Materialparameter auf die Versuchsergebnisse angepasst werden und zum anderen der Einfluss der Modellierung auf die Ergebnisse untersucht werden soll. Außerdem soll die Nachrechnung des Erhitzer Versuchs (HFCEP), ebenfalls aus dem COSA II Projekt, durchgeführt werden. Bis zum 3. Projektworkshop am 23. und 24.05.2011 in Bingen wurden diese Berechnungen durchgeführt und beim Workshop vorgestellt und diskutiert. Der im Stoffgesetz Lubby-MDCF implementierte Ansatz zur Verheilung wurde vorgestellt. Weitere Berechnungen wurden festgelegt, mit Randbedingungen, die von allen Projektpartnern bei ihren Berechnungen berücksichtigt werden sollen.

Zum gegenwärtigen Berichtszeitpunkt werden die oben genannten Berechnungen durchgeführt. Zuvor wurden die Materialparameter mit den neuen Randbedingungen den Versuchsergebnissen aus den ECN versuchen neu angepasst, um die Ergebnisse genauer abbilden zu können. Erste Schwierigkeiten mit der Version 4.00 von Flac3D, wie z. B. bei den thermo-mechanisch gekoppelten Berechnungen wurden ebenfalls behoben.

4. Geplante Weiterarbeiten

Während die Arbeiten mit den gemeinsam beschlossenen Berechnungen weiterlaufen, sollen außerdem Laborergebnisse der Verheilungsversuche der TUC analytisch und numerisch analysiert und untereinander gegenübergestellt werden. Gegebenenfalls werden Verbesserungen am Verheilungsansatz durchgeführt. Diese Arbeiten werden beim nächsten Workshop im September vorgestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

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

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

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

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

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

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 10860
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 30.09.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 198.091,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Stahlmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung

AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger beteiligt sich an dem Stoffgesetzvergleich im Teilvorhaben 6 mit dem Stoffgesetz für Steinsalz nach Döring und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen zurzeit das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D der Firma Itasca.

Auf dem zweiten Projektworkshop am 09. und 10.02.2011 am Institut für Nukleare Entsorgung in Karlsruhe wurden die ersten Ergebnisse der Berechnungen für den COSA II Versuch "IFC" vorgestellt und das weitere Vorgehen für die COSA II Versuche "HFPC" und "HPP" abgestimmt. Sandia schlug als zusätzliche Vergleichsberechnungen für die Verbundpartner der "Room H" in der WIPP vor.

Im Rahmen des dritten Projektworkshops in Bingen am 23. und 24.05.2011 wurden weitere Ergebnisse der COSA II Versuche vorgestellt und die Randbedingungen für die Erhitzerversuche festgelegt. Ebenso wurden erste Überlegungen zur Abbildung der Verheilung mit den Projektpartnern diskutiert. Außerdem wurden auch die Fragestellungen erörtert, die sich aus dem Update für die Software FLAC 3D ergeben.

Im Berichtszeitraum wurden die Berechnungen für die COSA II Versuche "IFC" und "HFPC" durchgeführt. Hierzu wurde ein numerisches Modell entwickelt, das den im dritten Workshop abgestimmten Randbedingungen entspricht.

Zudem wurde die Implementierung des Stoffgesetzes nach Döring in das FEM-Programmsystem ANSYS umgesetzt. Zurzeit wird das Stoffgesetz in ANSYS validiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Auf der Grundlage der Ausführungen von Herrn Schulze, BGR auf dem dritten Projektworkshop sollen die Formulierungen für die Dilatanzgrenze und die Bruchgrenze angepasst werden. Zudem sind aufgrund der Berechnungen zu den Erhitzerversuchen geringfügige Anpassungen der Temperaturabhängigkeit vorgesehen.

Auf Basis der Ergebnisse der Verheilungsversuche soll für das Stoffgesetz ein Verheilungsterm formuliert werden.

Nach Abschluss der Implementierung und Validierung des Stoffgesetzes in ANSYS werden die COSA II Versuche ("IFC" und "HFPC") modelliert und nachgerechnet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

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

Auftragnehmer: Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg		Förderkennzeichen: 02 E 10870
Vorhabensbezeichnung: Instrumente, Bedarf und Potentiale für Wissensmanagement in der Endlagerforschung		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 30.11.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 125.719,00 EUR	Projektleiter: Schmidt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist es, die modernen Methoden und Werkzeuge des Wissensmanagements aufzuzeigen, die prinzipiell für die Endlagerforschung zur Verfügung stehen und die Bedürfnisse und Erwartungen der Nutzer von Wissen aus dem Bereich der Endlagerforschung an solche Systeme zu erfassen, um durch Kombination verschiedener Wissensmanagementtools deren Vor- und Nachteile hinsichtlich ihrer Möglichkeiten, des Implementierungs- und Pflegeaufwands näher zu betrachten und zu bewerten.

Das Vorhaben trägt dazu bei, die Anwendungsmöglichkeiten von Instrumenten auszuloten, die in Wirtschaft und Verwaltung heute bereits eingesetzt werden. Das Ziel ist, mit deren Einsatz die Forschung transparenter zu machen und die Verfügbarkeit von Ergebnissen und deren Übersichtlichkeit zu verbessern.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Zusammenstellung von aktuellen Methoden und Werkzeugen des Wissensmanagements:

Diese Bestandsaufnahme soll einen breiten Überblick über den verfügbaren Stand der Technik beim Wissensmanagement geben. Die Zusammenstellung erfolgt so, dass auf inhaltsorientierte Systeme detaillierter eingegangen wird, weil diese bei möglichen Anwendungen im Bereich Endlagerforschung relevanter sind.

AP2: Ermittlung des Nutzungspotenzials:

Durch Befragung von in der Endlagerforschung tätigen Personen/Organisationen soll der bisherige Stand des Wissensmanagements und der bei Nutzern vorhandene Bedarf für solche Instrumente erhoben werden. Daraus werden Vorschläge erarbeitet, wie Bedürfnisse und Wünsche in einem System berücksichtigt werden können (im Sinne eines übergeordneten und priorisierten „Pflichtenhefts“ für WM-Systeme).

AP3: Entwicklung und Bewertung von Wissensmanagementmethoden für die Endlagerforschung:

Es werden Methoden und Werkzeuge des Wissensmanagement mit dem ermittelten Bedarf kombiniert und mögliche Szenarien entwickelt. Die Szenarien werden bewertet (z. B. nach Aufwand, Nutzerfreundlichkeit, Transparenz, Kompatibilität mit vorhandenen Teillösungen) und günstige Lösungswege aufgezeigt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im I. und II. Quartal wurden hauptsächlich die Arbeitspakete AP1 und AP2 bearbeitet.

Die Arbeiten für AP1, der Darlegung der Grundbegriffe, Methoden und Techniken des Wissensmanagements, der Beschreibung verschiedener Anwendungsbeispiele für Wissensmanagement und dem Aufzeigen der Hemmnisse und Schwierigkeiten wurden weitgehend abgeschlossen. Daraus werden im weiteren Projektverlauf Rahmenbedingungen und Voraussetzungen für die IT-Unterstützung des Wissensmanagements der Endlagerforschung erarbeitet. Mittels des ausgearbeiteten Fragebogens wurden in AP2 Telefoninterviews mit je einem Mitarbeiter verschiedener in der deutschen Endlagerforschung tätigen Institutionen geführt. Die Ergebnisse der Telefoninterviews wurden zusammengefasst und ausgewertet. Die Antworten zu den verschiedenen Fragenkomplexen wurden dazu nach typisierten Organisationsprofilen aggregiert, so dass die einzelnen Ergebnisse veröffentlicht werden können, aber nicht mehr einer konkreten Organisation zuordnen lassen (Schutz der Einzeldaten). Die Befragung internationaler Institutionen wurde vorbereitet, dazu wurde ein englischsprachiger Fragebogen erstellt.

Weiterhin wurde im März 2011 ein Statusgespräch zur Diskussion der vorläufigen Ergebnisse aus den Arbeitspaketen AP1 und AP2 vorbereitet und erfolgreich durchgeführt. Die Teilnehmer haben dabei wertvolle Hinweise eingebracht.

Zu AP3 wurden die vorläufigen Ergebnisse der AP1 und AP2 sowie aus dem Statusgespräch von März 2011 hinsichtlich des technischen Standes und der Nutzererwartungen analysiert und im Hinblick auf diese ausgewertet. Aufgrund der Vielfalt von Nutzererwartungen wurden sowohl typische als auch anwenderspezifische Situationen herausgearbeitet und die verfügbaren Instrumente daneben gestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Gemäß dem aktuellen Zeitplan wird für das zweite Halbjahr 2011 geplant:

- Restarbeiten zu den AP1 und AP2
- Weiterführung und Abschluss der Arbeiten zum AP3
- Entwurf des Abschlussberichts

5. Berichte, Veröffentlichungen

Angelika Spieth-Achtnich: Präsentation „Wissensmanagement in der Endlagerung - Instrumente, Potentiale und Bedarf; Zwischenergebnisse des Arbeitspakets 2“, 1. Statusgespräch, Darmstadt, 09.03.2011

Achim Steinacker: Präsentation „Instrumente des Wissensmanagements“, 1. Statusgespräch, Darmstadt, 09.03.2011

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 10880
Vorhabensbezeichnung: Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2010 bis 31.05.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 519.570,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Voigt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Phasenbildung im Grundsystem MgO-MgCl₂-H₂O bei erhöhten Temperaturen (40 °C, 60 °C, 80 °C)

AP2: Einfluss von Sulfat und Calcium auf die Sorelphasenbildung

AP3: Schlussfolgerungen für die Rezepturentwicklung

AP4: Expansionsdruck von Sorelphasen

AP5: Vorschlag für In-situ-Versuch

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die Daten der Lösegleichgewichte im $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$ System bei 40 °C wurden ermittelt. Demnach ist auch bei 40 °C die 3-1-8 Phase die thermodynamisch stabile Phase im System (eine Publikation der Ergebnisse zusammen mit den 25 °C-Daten wird vorbereitet). Für 60 °C wurden die Langzeitversuche angesetzt.

AP2: Ansätze zur Bestimmung der Lösegleichgewichte im $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ System bei 25 °C und 40 °C laufen.

AP3: Es wurden für 6 ausgewählte MgO-Typen, 1. Magnesia M2923 (hoch reaktiv), 2. M298 (weniger reaktiv), 3.-5. Styromag DF80, K10 und KF, 6. F4-200 vom Lehmann & Voss die Reaktivitätsparameter (Übersättigung, BET, Korngröße, Zitronensäuretest) bestimmt. Es zeigt sich die Reaktivitätsreihung: $\text{M2923} \gg (\text{DF80} > \text{K10} > \text{KF}) > \text{F4-200} > \text{M298}$. Die röntgenographischen Untersuchungen zeigen, dass M2923 und M298 phasenrein sind. Die Styromag-Proben enthalten Talk, Dolomit, Calcit und Vermiculit. Die Fremdphase im F4-200 konnte noch nicht identifiziert werden. Im Ergebnis wurde die MgO-Type DF80 (Styromag) für eine 3-1-8-Rezeptur (R1a) mit 5molaler MgCl_2 -Lösung als Anmischlösung ausgewählt und in der Verarbeitung getestet (Viskositätsmessungen). Die Zielviskosität (nach MB10, GV1 CARLA-Projekt) wird für die Styromag-Proben DF80 und K10 nach einer intensiven Mischzeit von 2 h und einer weiteren Stunde Messzeit erreicht, die mit M2923 überschritten. M298 und F4-200 erwiesen sich mit dieser Rezeptur als nicht verarbeitbar (Viskosität generell zu niedrig). Von allen MgO-Typen wurden nach 6 Monaten neue Chargen bestellt, um die Reaktivität (Schwankungsbreite) erneut zu ermitteln, ebenso der 6 Monate gelagerten Chargen.

AP4: Für die Untersuchungen des Expansionsverhaltens sind folgende Messungen mit Bindemittelphase (R1a) in Vorbereitung:

- Kegel: freie Expansion = $f(t)$
- Quelldruckapparatur: Expansionsdruck bei $V = \text{konst.}$
- Oedometer: Expansion bei $\sigma = \text{konst.}$

Zu Pkt. 2 werden derzeit 6 Quelldruckapparatur-Zellen aufgebaut, 3 davon temperierbar. Es erfolgte die Überprüfung der Quelldruckapparatur/Druckmesszellen im Messbereich bis 100 bar bzw. findet noch statt. Ein Flüssigkeitsdruckgeber mit Messbereich bis max. 35 bar wird noch bestellt. An der Temperierung/-regelung der anderen 3 Zellen wird gearbeitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weitere Ansätze zu Lösegleichgewichten bei hohen Temperaturen (AP1, AP2).

Auswertung und Vergleich der Reaktivitätsdaten (AP3).

Großansatz der R1a-Rezeptur zur Untersuchung des temperaturabhängigen Phasen- und Gefügebildung sowie des Expansionsverhaltens (AP4).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10890
Vorhabensbezeichnung: Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche	
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2010 bis 31.10.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.547.015,00 EUR	Projektleiter: Rothfuchs

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll ein leistungsstarkes Instrument zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager sowie zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen bereit gestellt werden. Mit der Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und der Ableitung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen leistet das Projekt auch einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen und trägt damit insgesamt zur zeitnahen Entwicklung eines fundierten Safety Case nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation bei.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1:

Die zum Projektbeginn aufgenommenen Arbeiten für die umfassende Anforderungsanalyse an die zu entwickelnde Softwareplattform wurden planmäßig im Mai 2011 mit der Vorlage einer vorläufigen Endversion des von IFF in Abstimmung mit den Projektpartnern erstellten Pflichtenheftes abgeschlossen. Die Datenübernahme von openGEO nach Virtus wird als weitgehend geklärt betrachtet, während der Geologie-/Geometrieexport von VIRTUS an die PLCs sowie die Darstellung von PLC-Ergebnisgrößen in Virtus offene Fragen beinhalten.

AP1.2:

Auf Basis der in AP1.1 durchgeführten Anforderungsanalyse wurde mit dem Entwurf der Softwarearchitektur für die VIRTUS Plattform begonnen. Die Grundlage der Plattform soll das am Fraunhofer IFF entwickelte VDT-Framework bilden, welches um Methoden zum Import von geologischen 3D-Modellen sowie der Vorbereitung und Auswertung von PLC Simulationen, erweitert werden soll.

AP2:

Die im Vorprojekt zusammengestellten Literaturlisten wurden nochmals überprüft, ergänzt und im April 2011 vorläufig abgeschlossen. Das nachfolgende Literaturscreening wurde noch im Juni aufgenommen.

Das Pflichtenheft zur Erfassung der konsolidierten und qualitätsgeprüften THM-Daten ist weitgehend entwickelt. Die Eingabeformulare sind entwickelt und werden z. Zt. durch wiederholte Dateneingabetests optimiert. Das Pflichtenheft soll zukünftig routinemäßig auf den Sitzungen der AG Literatur angesprochen und jeweils auf Vollständigkeit/Sinnfälligkeit geprüft und ggf. ergänzt/weiterentwickelt werden. Darüber hinaus wurde eine Liste der zu erfassenden Geomaterialien bzw. auch weiterer Materialien (z. B. Nebengesteine, Materialien in den Leitexperimenten usw.) erstellt, die in der Datenbasis Berücksichtigung finden sollen. Hierbei soll auch nach Standorten unterschieden werden. Bei der Dateneingabe soll zunächst der „Standort VIRTUS“ vorrangig mit Daten aufgefüllt werden, wobei die Daten aber auch jeweils dem Standort zusätzlich zugewiesen werden sollen, von dem sie stammen. Insgesamt werden somit geprüfte THM-Datenbasen für die vier Standorte Asse, Morsleben, Gorleben und VIRTUS entstehen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Auswertung der vorhandenen Primärliteratur mit Ableitung einer konsolidierten qualitätsgesicherten Datenbasis für die PLC Simulationen (GRS, DBETEC, BGR)
- Weiterentwicklung eines Datenbankschemas (GRS, DBETEC, BGR)
- Weiterentwicklung der Bedienoberfläche und Integration der DB in VIRTUS (GRS)
- Dateneingabe, Revisionen von Datenbankstruktur und Eingabeoberfläche (GRS, DBETEC, BGR)
- Abschließende Erarbeitung einer Lösung für Geologie-/Geometrieexport sowie die Darstellung von PLC-Ergebnisgrößen im VIRTUS (GRS, DBETEC, BGR)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10900
Vorhabensbezeichnung: Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2010 bis 31.10.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 190.969,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll ein leistungsstarkes Instrument zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager sowie zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen bereit gestellt werden. Mit der Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und der Ableitung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen leistet das Projekt auch einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen und trägt damit insgesamt zur zeitnahen Entwicklung eines fundierten Safety Case nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation bei.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1: Die zum Projektbeginn aufgenommenen Arbeiten für die umfassende Anforderungsanalyse an die zu entwickelnde Softwareplattform wurden planmäßig im Mai 2011 mit der Vorlage einer vorläufigen Endversion des von IFF in Abstimmung mit den Projektpartnern erstellten Pflichtenheftes abgeschlossen. Die Datenübernahme von openGEO nach Virtus wird als weitgehend geklärt betrachtet, während der Geologie-/Geometrieexport von VIRTUS an die PLCs sowie die Darstellung von PLC-Ergebnisgrößen in Virtus offene Fragen beinhalten.

AP1.2: Auf Basis der in AP1.1 durchgeführten Anforderungsanalyse wurde mit dem Entwurf der Softwarearchitektur für die VIRTUS Plattform begonnen. Die Grundlage der Plattform soll das am Fraunhofer IFF entwickelte VDT-Framework bilden, welches um Methoden zum Import von geologischen 3D-Modellen der Vorbereitung und Auswertung von PLC Simulationen, erweitert werden soll.

AP2: Die im Vorprojekt zusammengestellten Literaturlisten wurden nochmals überprüft, ergänzt und im April 2011 vorläufig abgeschlossen. Das nachfolgende Literaturscreening wurde noch im Juni aufgenommen.

Das Pflichtenheft zur Erfassung der konsolidierten und qualitätsgeprüften THM-Daten ist weitgehend entwickelt. Die Eingabeformulare sind entwickelt und werden z. Zt. durch wiederholte Dateneingabetests optimiert. Das Pflichtenheft soll zukünftig routinemäßig auf den Sitzungen der AG Literatur angesprochen und jeweils auf Vollständigkeit/Sinnfälligkeit geprüft und ggf. ergänzt/weiterentwickelt werden. Darüber hinaus wurde eine Liste der zu erfassenden Geomaterialien bzw. auch weiterer Materialien (z. B. Nebengesteine, Materialien in den Leitexperimenten usw.) erstellt, die in der Datenbasis Berücksichtigung finden sollen. Hierbei soll auch nach Standorten unterschieden werden. Bei der Dateneingabe soll zunächst der „Standort VIRTUS“ vorrangig mit Daten aufgefüllt werden, wobei die Daten aber auch jeweils dem Standort zusätzlich zugewiesen werden sollen, von dem sie stammen. Insgesamt werden somit geprüfte THM-Datenbasen für die vier Standorte Asse, Morsleben, Gorleben und VIRTUS entstehen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Auswertung der vorhandenen Primärliteratur mit Ableitung einer konsolidierten qualitätsgesicherten Datenbasis für die PLC Simulationen (GRS, DBETEC, BGR)
- Weiterentwicklung eines Datenbankschemas (GRS, DBETEC, BGR)
- Weiterentwicklung der Bedienoberfläche und Integration der DB in VIRTUS (GRS)
- Dateneingabe, Revisionen von Datenbankstruktur und Eingabeoberfläche (GRS, DBETEC, BGR)
- Abschließende Erarbeitung einer Lösung für Geologie-/Geometrieexport sowie die Darstellung von PLC-Ergebnisgrößen in VIRTUS (GRS, DBETEC, BGR)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 10910
Vorhabensbezeichnung: Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2010 bis 31.10.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 372.697,00 EUR	Projektleiter: Behlau	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll ein leistungsstarkes Instrument zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager sowie zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen bereit gestellt werden. Mit der Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und der Ableitung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen leistet das Projekt auch einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen und trägt damit insgesamt zur zeitnahen Entwicklung eines fundierten Safety Case nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation bei.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1: Die zum Projektbeginn aufgenommenen Arbeiten für die umfassende Anforderungsanalyse an die zu entwickelnde Softwareplattform wurden planmäßig im Mai 2011 mit der Vorlage einer vorläufigen Endversion des von IFF in Abstimmung mit den Projektpartnern erstellten Pflichtenheftes abgeschlossen. Die Datenübernahme von openGEO nach Virtus wird als weitgehend geklärt betrachtet, während der Geologie-/Geometrieexport von VIRTUS an die PLCs sowie die Darstellung von PLC-Ergebnisgrößen in Virtus offene Fragen beinhalten.

AP1.2: Auf Basis der in AP1.1 durchgeführten Anforderungsanalyse wurde mit dem Entwurf der Softwarearchitektur für die VIRTUS Plattform begonnen. Die Grundlage der Plattform soll das am Fraunhofer IFF entwickelte VDT-Framework bilden, welches um Methoden zum Import von geologischen 3D-Modellen, sowie der Vorbereitung und Auswertung von PLC Simulationen, erweitert werden soll.

AP2: Die im Vorprojekt zusammengestellten Literaturlisten wurden nochmals überprüft, ergänzt und im April 2011 vorläufig abgeschlossen. Das nachfolgende Literaturscreening wurde noch im Juni aufgenommen.

Das Pflichtenheft zur Erfassung der konsolidierten und qualitätsgeprüften THM-Daten ist weitgehend entwickelt. Die Eingabeformulare sind entwickelt und werden z. Zt. durch wiederholte Dateneingabetests optimiert. Das Pflichtenheft soll zukünftig routinemäßig auf den Sitzungen der AG Literatur angesprochen und jeweils auf Vollständigkeit/Sinnfälligkeit geprüft und ggf. ergänzt/weiterentwickelt werden. Darüber hinaus wurde eine Liste der zu erfassenden Geomaterialien bzw. auch weiterer Materialien (z. B. Nebengesteine, Materialien in den Leitexperimenten usw.) erstellt, die in der Datenbasis Berücksichtigung finden sollen. Hierbei soll auch nach Standorten unterschieden werden. Bei der Dateneingabe soll zunächst der „Standort VIRTUS“ vorrangig mit Daten aufgefüllt werden, wobei die Daten aber auch jeweils dem Standort zusätzlich zugewiesen werden sollen, von dem sie stammen. Insgesamt werden somit geprüfte THM-Datenbasen für die vier Standorte Asse, Morsleben, Gorleben und VIRTUS entstehen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Auswertung der vorhandenen Primärliteratur mit Ableitung einer konsolidierten qualitätsgesicherten Datenbasis für die PLC Simulationen (GRS, DBETEC, BGR)
- Weiterentwicklung eines Datenbankschemas (GRS, DBETEC, BGR)
- Weiterentwicklung der Bedienoberfläche und Integration der DB in VIRTUS (GRS)
- Dateneingabe, Revisionen von Datenbankstruktur und Eingabeoberfläche (GRS, DBETEC, BGR)
- Abschließende Erarbeitung einer Lösung für Geologie-/Geometrieexport sowie die Darstellung von PLC-Ergebnisgrößen in VIRTUS (GRS, DBETEC, BGR)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 10921
Vorhabensbezeichnung: Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA- (TV1)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2011 bis 30.04.2012	Berichtszeitraum: 01.04.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 123.043,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kudla	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Teilvorhaben TV1 des Projektes beinhaltet alle Vorarbeiten für die Entwicklung bzw. die Weiterentwicklung eines Schachtverschlusskonzeptes für ein HAW-Endlager. Diese Arbeiten sind die Voraussetzung für die vorgesehene Abstimmung mit internationalen Partnern, die sowohl Interesse an einer anschließenden gemeinsame Konzeptplanung, als auch an der Vorbereitung und Realisierung des Konzeptes im Rahmen von Labor- und In-situ-Versuchen auf Basis der internationalen Technologieplattform haben. Das zukünftige Schachtverschlusskonzept wird parallel für Endlager in einer Salzformation und für mögliche Endlagerstandorte im Tonstein entwickelt und soll modular aufgebaut sein, damit es auf unterschiedliche lokale geologische Situationen und hydromechanische Randbedingungen angepasst werden kann. Schwerpunkte der Untersuchungen liegen in der Definition von Anforderungen und Randbedingungen für Schachtverschlüsse für HAW-Endlager in den Wirtsgesteinen Salz und Tonstein sowie in der Identifikation des FuE-Bedarfs für die nachfolgenden Teilvorhaben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Stand von Wissenschaft und Technik zu langzeitstabilen Schachtverschlüssen
- AP2: Sicherheitsnachweis - Konzept der Nachweisführung
- AP3: Randbedingungen für die Wirtsgesteine Salz und Tonstein
- AP4: Anforderungen
- AP5: Einbindung internationaler Partner
- AP6: Abschlussbericht

Die TU BAF ist federführend für AP1 und AP5 und bearbeitet im AP3 die Unterpunkte Geomechanische Randbedingungen, Charakterisierung bestimmender Strömungs- und Transportprozesse und Geochemische Randbedingungen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Analyse der seit 1994 (nach der GSF-Vorstudie zu Schachtverschlüssen) realisierten Schachtverschlüsse: Diese basieren auf dem Schachtverschlusskonzept "Salzdetfurth". Gleichzeitig sind einige "klassische" Verschlüsse mit Betonwiderlagern und kombinierten Dichtungen aus Ton und Bitumen bzw. Gussasphalt gebaut worden. Weiterhin wurden die Konzepte bzw. Entwürfe für die Schachtverschlüsse ERAM, Asse, Konrad, WIPP, NAGRA, RESEAL sowie der Projektvorschlag LASA (GRS & TUC) diskutiert.
- AP3: Beginn der Arbeiten zu geomechanischen und geochemischen Randbedingungen.
- Allg.: Abschluss der Kooperationsvereinbarung mit dem Projektpartner DBE Technology GmbH.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Analyse internationaler Aktivitäten zu Schachtverschlüssen im Tonstein und im Hartgestein hinsichtlich der Sicherheitsbewertung. Vorbereitung eines internationalen Workshops.
- AP3: Beginn der Arbeiten zu geomechanischen und geochemischen Randbedingungen.
- AP5: Kontaktaufnahme mit potentiellen internationalen Partnern (NAGRA, ANDRA, SKB, SANDIA).
- Allg.: Vertragsabschluss mit dem Unterauftragnehmer IBeWa.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10931
Vorhabensbezeichnung: Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA- (TV2)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2011 bis 30.04.2012	Berichtszeitraum: 01.04.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 240.168,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Teilvorhaben TV1 des Projektes beinhaltet alle Vorarbeiten für die Entwicklung bzw. die Weiterentwicklung eines Schachtverschlusskonzeptes für ein HAW-Endlager. Diese Arbeiten sind die Voraussetzung für die vorgesehene Abstimmung mit internationalen Partnern, die sowohl Interesse an einer anschließenden gemeinsame Konzeptplanung, als auch an der Vorbereitung und Realisierung des Konzeptes im Rahmen von Labor- und In-situ-Versuchen auf Basis der internationalen Technologieplattform haben. Das zukünftige Schachtverschlusskonzept wird parallel für Endlager in einer Salzformation und für mögliche Endlagerstandorte im Tonstein entwickelt und soll modular aufgebaut sein, damit es auf unterschiedliche lokale geologische Situationen und hydromechanische Randbedingungen angepasst werden kann. Schwerpunkte der Untersuchungen liegen in der Definition von Anforderungen und Randbedingungen für Schachtverschlüsse für HAW-Endlager in den Wirtsgesteinen Salz und Tonstein sowie in der Identifikation des FuE-Bedarfs für die nachfolgenden Teilvorhaben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Stand von Wissenschaft und Technik zu langzeitstabilen Schachtverschlüssen
- AP2: Sicherheitsnachweis - Konzept der Nachweisführung
- AP3: Randbedingungen für die Wirtsgesteine Salz und Tonstein
- AP4: Anforderungen
- AP5: Einbindung internationaler Partner
- AP6: Abschlussbericht

Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für AP2 und AP4 und bearbeitet im AP3 die Unterpunkte Charakterisierung der EDZ und Ableitung von Kenntnisdefiziten.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Allgemein:

Im Berichtszeitraum wurde eine Kooperationsvereinbarung mit dem Projektpartner TU Bergakademie Freiberg entwickelt, abgestimmt und verbindlich unterzeichnet.

Am 10. Juni fand im Hause der GRS Braunschweig ein Planungsgespräch statt, bei dem sich die Beteiligten Institutionen TU BAF, DBE TECHNOLOGY, GRS und TU Clausthal im Beisein des BMWi zunächst gegenseitig über laufende bzw. in Planung befindliche FuE-Vorhaben zu geotechnischen Barrieren informierten. Das Planungsgespräch diente zur Entwicklung eines abgestimmten Konzepts zur Einbringung eines Internationalen Verbundprojekts Schachtverschluss unter deutscher Federführung (BMW) in die „Implementing Geological Disposal Technology Platform (IGD-TP)“. Im Ergebnis wird ein Plan erstellt, der die Zusammenführung der einzelnen Vorhaben in ein Verbundprojekt darstellt.

AP3:

Im Rahmen dieses Arbeitspaketes soll u. a. die Größe der Auflockerungszone anhand indikativer numerischer Berechnungen für den Schacht in Gorleben sowie für zwei potenzielle Schächte in den zwei eignungshöffigen Tonsteinregionen in Deutschland abgeschätzt werden. Die Berechnungen werden mit dem Computercode FLAC3D durchgeführt.

Im Berichtszeitraum wurde ein Modell für den Schacht in Gorleben entwickelt, das den zeitlichen Verlauf des Schachtabteufens realitätsnah berücksichtigt. Ebenso wurde die Schachtbewetterung mit ihrem thermomechanischen Einfluss berücksichtigt. Die Berechnungen zeigen einen deutlichen Einfluss der Schachtbewetterung auf die Entwicklung der Auflockerungszone.

Parallel dazu wurden Modelle für generische Schächte in den zwei zu betrachtenden Tonsteinregionen in Deutschland erstellt. Basierend auf dem im früheren FuE-Vorhaben GENESIS zusammengestellten Datenmaterial wurden die Berechnungen aufgenommen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Beginn der Arbeiten zur Erstellung des Konzeptes zur Nachweisführung

AP3: Weiterführung der Arbeiten zur Charakterisierung der EDZ

AP4: Beginn der Arbeiten zur Formulierung von Anforderung und Auswahlkriterien für Schachtverschlüsse

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10941	
Vorhabensbezeichnung: Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2011 bis 30.04.2014		Berichtszeitraum: 01.05.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 852.100,00 EUR		Projektleiter: Dr. Becker	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Methoden der globalen Sensitivitätsanalyse: Es ist ein ausführlicher Überblick über die Methoden der globalen Sensitivitätsanalyse sowie die Verfahren zur Stichprobenziehung zu erarbeiten. Die Methoden werden klassifiziert und hinsichtlich ihrer Eignung für den Einsatz im Rahmen von Sicherheitsnachweisen für Endlager bewertet. Laufende Aktivitäten und Entwicklungen im internationalen Bereich werden verfolgt und ausgewertet.

AP2: Definition von Testfällen: Es sind mehrere Testmodelle und -szenarien zu definieren, anhand derer die verschiedenen Methoden getestet und verglichen werden können. Es sollen vorrangig Modelle für Salz- und Tonformationen betrachtet werden.

AP3: Durchführung und Auswertung von Testrechnungen: Die im AP1 identifizierten Methoden der Sensitivitätsanalyse werden auf die Testfälle angewandt, soweit dies nach theoretischen Überlegungen sinnvoll erscheint.

AP4: Anpassung von Methoden und Bereitstellung für die Anwendung: Aufgrund von Ergebnissen der Arbeitspakete 1 und 3 werden diejenigen Methoden identifiziert und ggf. weiterentwickelt, die für die Anwendung bei der Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern besonders geeignet erscheinen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen von AP1 wurde mit einer Bestandsaufnahme klassischer und moderner Methoden der globalen Sensitivitätsanalyse sowie ihrer Anwendung auf Endlagerprobleme unter Berücksichtigung eigener Vorarbeiten begonnen. Weiterhin wurde mit der Definition von Testfällen (AP2) begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Es werden voraussichtlich vier standardisierte Testmodelle definiert und dokumentiert, die die folgenden generischen Endlagerkonzepte beschreiben:

- ein Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle im Salzgestein,
- ein Endlager für Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung im Salzgestein,
- ein Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle im Tongestein,
- ein Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle im Granit.

Unter Zugrundelegung dieser Testfälle wird mit der Vorbereitung von Testrechnungen begonnen. Dazu müssen Daten zusammengestellt und ggf. Rechenprogramme angepasst werden. Weiter ist geplant, zu untersuchen, inwieweit sich mithilfe von Emulationsverfahren der Rechenaufwand reduzieren lässt.

Die Zusammenstellung von Methoden der Sensitivitätsanalyse wird fortgeführt. Dabei sollen auch Erfahrungen aus anderen Ländern berücksichtigt werden. Hierzu ist eine Kontaktaufnahme mit verschiedenen Institutionen (JRC Ispra, Sandia, und weitere) geplant. Weiterhin ist die Teilnahme an Fachkonferenzen und -seminaren vorgesehen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10951
Vorhabensbezeichnung: Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA	
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2011 bis 31.05.2014	Berichtszeitraum: 01.06.2011 bis 30.06.2011
Gesamtkosten des Vorhabens: 588.400,00 EUR	Projektleiter: Dr. Flügge

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Durchführung von zwei Arbeitsgesprächen zur Planung der Diffusionsexperimente.

Ein Angebot für einen Auftrag zur Fertigung der Messzellen wurde bei der Firma InfraServ angefordert. Ein Angebot für eine Schlauchpumpe wurde bei der Firma Ismatec angefordert. Verschraubungen für die Zellen wurden bei der Firma Swagelok bestellt.

Eine Literaturrecherche zur Auswahl der Tracer wurde begonnen. Der Einsatz von Farbstoffen wird aufgrund der verringerten Lumineszenzintensität in salinen Lösungen und ihrer Sorptionseigenschaften nicht mehr angestrebt. Bromid und Iodid sollen als anionische Tracer verwendet werden, wobei zur Verhinderung von Photooxidation von Bromid die Lichteinstrahlung minimiert werden muss. Als kationischer Tracer soll Caesium eingesetzt werden.

Die Firma k+s kann der GRS 100 kg Salzgrus aus dem Hauptsalz der Staßfurt-Folge bereitstellen. Das Material entspricht stratigraphisch dem im Projekt REPOPERM verwendeten Material und muss vor Versuchsbeginn auf eine ähnliche Korngröße zerkleinert werden.

Erste abschätzende Rechnungen zur Versuchsdauer wurden mit dem Programm Rockflow durchgeführt. Bei vernachlässigbarer Sorption und einer Länge des Versuchskörpers von 8 cm beträgt die Versuchsdauer bei einem effektiven Diffusionskoeffizienten von $1 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ voraussichtlich etwa 30 Tage, bei einem effektiven Diffusionskoeffizienten von $1 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ voraussichtlich etwa 300 Tage.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Beschaffung der Messzellen mit Zubehör, Beschaffung aller notwendigen Materialien und Instrumente.
- Festlegung der zu verwendenden Tracer und ihrer Konzentrationen.
- Vorversuche zum Einbau von Salzgrus in die Messzellen.
- Vorversuche zur Gleichgewichtseinstellung von Salzgrus mit der zu verwendenden Salzlösung.
- Vorversuche zu Wechselwirkungen der ausgewählten Tracer mit Salzlauge/Salzgrus und ihrer Sorptionseigenschaften.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

2.2 C-Vorhaben

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 C 1628
Vorhabensbezeichnung: Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung - Phase 2, Kurztitel: WeDa-II	
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2009 bis 31.12.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.462.376,00 EUR	Projektleiter: Dr. Moog

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Weiterentwicklung einer einheitlichen, umfassenden und konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis zur geochemischen Modellierung von Nah- und Fernfeldprozessen für die derzeit in Deutschland diskutierten oder bereits realisierten Wirtsformationen untertägiger Entsorgungseinrichtungen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektmanagement
- AP2: Datenbank
- AP3: Schnittstellen
- AP4: Datenerfassung
- AP5: Datenbewertung
- AP6: Qualitätsmanagement
- AP7: Dokumentation
- AP8: Thermodynamische Datenbasis für Phosphat

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Projektmanagement: Koordination des Gesamtvorhabens

Datenbank:

Weiterführung der Arbeiten an Skripten zur Eingabeüberprüfung in THEREDA; Umsetzung von Datenbank-Änderungen gemäß Beschlüssen des Verbunds; Einspielung von neuen Datenbanktabellen und Ergänzung bestehender Datenbanktabellen um weitere Attribute mit Bezug zur Speicherung von Daten für die Oberflächenkomplexierung.

Schnittstellen:

- Ergänzung und Aktualisierung des Pflichtenheftes als Grundlage für eine web-basierte Bedienoberfläche für THEREDA (Fremdauftrag in 2011), insbesondere Einarbeitung des Audits
- Test der Parameterdatei-Generatoren für PHREEQC und CHEMAPP

Datenerfassung: -

Datenbewertung: -

Qualitätsmanagement: -

Dokumentation:

- Erstellung von bzw. Mitarbeit an Technical Papers: "Elements and Criteria of Quality Assurance for Data Input and Assessment, Thermodynamic standard functions for pure water, Calculation of the fugacity of H₂O

Thermodynamische Datenbasis für Phosphat:

- Durchführung isopiestic Messungen in den folgenden Systemen: K₂HPO₄-KCl-H₂O, KH₂PO₄-K₂SO₄-H₂O, Na₂HPO₄-NaCl-H₂O, Na₂HPO₄-Na₂SO₄-H₂O, Na₂HPO₄-K₂HPO₄-H₂O, K₂HPO₄-K₂SO₄-H₂O, KH₂PO₄-K₂HPO₄-H₂O, NaH₂PO₄-Na₂SO₄-H₂O, NaH₂PO₄-Na₂HPO₄-H₂O und KH₂PO₄-NaCl-H₂O
- Literaturlauswertung zu den Mg- und Ca-Phosphaten

4. Geplante Weiterarbeiten

Projektmanagement:

- Koordination des Gesamtvorhabens

Datenbank:

- Verknüpfung von RES³T- und THEREDA-Daten
- Fortführung der Arbeiten an Skripten für die Durchführung von internen Berechnungen

Schnittstellen:

- Test der Parameterdatei-Generatoren für die Programme EQ3/6 (Versionen 7.2c und 8.0a) sowie Geochemist's Workbench)
- Begleitung der Entwicklungsarbeiten für die Bedienoberfläche

Dokumentation:

- Weiterarbeit an Technical Papers

Thermodynamische Datenbasis für Phosphat:

- Fortsetzung der Literaturlauswertung
- Fortsetzung der isopiestic Versuche
- Durchführung potentiometrischer Versuche in Ca- und Mg-Phosphat-Systemen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Eine Veröffentlichung zu unseren Daten für Cs^{+>} im System der ozeanischen Salze wird kurzfristig eingereicht. Zwei weitere (Sr^{<2+>} und Rb^{<+>}) sind in Vorbereitung.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 C 1638	
Vorhabensbezeichnung: Bentonit als Barrierematerial für den Abschluss von Untertagedeponien - Abschließende Versuche und eine Zusammenstellung von Wissenschaft und Technik (Kurztitel: Bentonit-Barrieren)			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2009 bis 31.12.2011		Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 934.111,00 EUR		Projektleiter: Dr. Xie	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Für die richtige Abschätzung der Dichtwirkung des Bentonits bzw. der durch den Bentonit transportierbaren Schadstoffmengen, ist die Kenntnis dieser Eigenschaften und Prozesse von ausschlaggebender Bedeutung. Die einzelnen Vorhabensziele zum Verständnis dieser Prozesse sind:

- Entwicklung des Verständnisses und Modellierung des Transports von Gasen durch hochkompaktierten Bentonit mit unterschiedlicher Sättigung des Porenraums an UTD-relevanten Salzlösungen,
- Modellierung des diffusiven Transports ausgewählter Schwermetalle durch eine mit Salzlösungen gesättigte Bentonitbarriere,
- Erstellung eines abschließenden Berichtes zum Kenntnisstand von Bentonit als Verfüll- und Dichtmaterial in Untertagedeponien (UTDs) für chemotoxische Abfälle.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Die experimentellen Arbeiten zum Gastransport umfassen Messungen zur Löslichkeit und zum Transport von Gasen unterschiedlicher Molekulargewichte in mit unterschiedlichen Lösungen gesättigten und teilgesättigten kompaktierten Bentonitproben.

AP2: Bei den Untersuchungen zum Schadstofftransport wird die Diffusion von Zn, Pb und Cd durch gesättigte Bentonitprobenkörper unterschiedlicher Trockendichte gemessen. Die Versuche erfolgen mit zwei unterschiedlich konzentrierten NaCl-Lösungen sowie, um auch realistische Bedingungen in einer UTD im Salinar zu erfassen, mit einer IP21-Lösung.

AP3: Abschlussbericht mit Zusammenfassung der Ergebnisse und Darstellung des Kenntnisstandes von Bentonitbarrieren.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Um die starke Schwankungsbreite der Messergebnisse zu reduzieren, erfolgte ein Umbau der Apparatur dahingehend, dass der Ausgangsgasstrom mittels eines Massendurchflussmessers geregelt wurde. Zur Vermeidung übermäßiger Temperaturschwankungen wurde die Messeinrichtung mit einer Haube versehen. Nach Durchführung dieser Maßnahmen war eine auswertbare Diffusion bei einer ungesättigten Probe insbesondere für Wasserstoff und Schwefelhexafluorid und zu realisieren. Bei Methan trat nur eine geringe Menge auf der Ausgangsseite auf. Kohlendioxid war nicht nachweisbar. Versuche an einer teilgesättigten Probe ergab, dass die Diffusionskoeffizienten höher ausgefallen waren als die des Materials im Anlieferungszustand. Diese Beobachtung wird an einer Probe mit nochmals höherem Feuchtgehalt überprüft. In beiden Fällen zeigte sich allerdings, dass der Diffusionskoeffizient für SF₆ am höchsten war. Im Anlieferungszustand ergab sich für H₂ und CH₄ kein eindeutiges Verhalten, wohingegen bei der teilgesättigten Probe der Diffusionskoeffizient am niedrigsten ausfiel.
- AP2: Vergleichende Diffusionsuntersuchungen mit dem herkömmlichen Verfahren und mit der neuen Methode wurden durchgeführt. Die Messungsdauer ist verkürzt und die Ergebnisse sind auch genauer.
Die Diffusionsuntersuchungen mit den Schadstoffen Pb²⁺, Cs⁺ und Cd²⁺ in der NaCl-Lösung wurden weitergeführt. Mit den Untersuchungen in der IP21-Lösung wurde begonnen.
- AP3: Der Abschlussbericht der mit Zusammenfassung der Ergebnisse und Darstellung des Kenntnisstandes von Bentonitbarrieren ist in Bearbeitung.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1:
- Diffusionsmessungen von SF₆, CH₄ und H₂ als Gasphase in teilgesättigten Probekörpern.
 - Testen der Funktion von Simulationsprogrammen für ungesättigte Materialien
 - Modellierung der Untersuchungsergebnisse
- AP2:
- Weiterführung der Diffusionsuntersuchungen mit Schwermetallen
 - Auswertung der Untersuchungsergebnisse
 - Modellrechnung unter Berücksichtigung von hoher Salinität
- AP3:
- Verfassen der Abschlussberichte (in Englisch)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Xie, M., O. Kolditz, and H. C. Moog (2011), A geochemical transport model for thermo-hydro-chemical (THC) coupled processes with saline water, *Water Resour. Res.*, 47, W02545, doi:10.1029/2010WR009270.

M. Xie (2011), Geochemical Calculations of Sealing Materials for HLW Repositories in Salt Rock Formation, Oral Presentation, EBS-TF Meeting, Jun. 28-Jul.01, Barcelona, Spain.

2.3 W-Vorhaben

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 W 6259
Vorhabensbezeichnung: Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Kernmaterialüberwachung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2009 bis 30.04.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 670.250,00 EUR	Projektleiter: Dr. Niemeyer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen der Vorhaben 02W6184, 02W6218 und 02W6243 auf und zielt ab auf Lösungsvorschläge zur Implementierung von Integrated Safeguards, Entwicklung von „State-Level-Approach“-spezifischen Kontrollmethoden sowie Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden hinsichtlich „Safeguards-by-Design“ für zukünftige Nuklearsysteme.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Weiterentwicklung von Safeguardstechnologien: Digitale Überwachungssysteme und Datenfernübertragung; Analyseverfahren für Fernerkundungsdaten
- Entwicklung neuer Safeguardstechnologien: Umweltbeobachtung; Lasertechniken
- Safeguards-by-Design
- Safeguards für Nuklearanlagen: Geologisches Endlager für abgebrannte Brennelemente; Zentrifugenanreicherungsanlagen
- Weiterentwicklung des „Staatskontrollansatzes“ auf europäischer Ebene
- Kooperation mit der Deutschen Gesellschaft für Auswärtige Politik (DGAP) zur technisch-politischen Schnittstelle der internationalen Safeguards
- Weiterentwicklung des nationalen Safeguards-Internet-Portals
- Entwicklung eines EURATOM-Auditierungsansatzes
- Weiterentwicklung von Safeguards-Überlegungen im Rahmen von „Triple-S“ (Sicherheit, Sicherung, Safeguards)
- Multinationale Ansätze
- Mitarbeit in der European Safeguards R&D Association (ESARDA)
- Kooperationen mit der International Safeguards Division des Institute of Nuclear Materials Management, mit dem King's College London und mit der Universität der Bundeswehr in München; Unterstützung von BMWi hinsichtlich der Beratungstätigkeiten in der Standing Advisory Group on Safeguards Implementation bei der IAEO.

Die Arbeiten erfolgen im internationalen Kontext nach vorgegebenen Zeitplänen von BMWi, Euratom und IAEO, parallel laufend und unter Einbeziehung in laufende internationale Diskussionen. Sie zielen ab auf die Bereitstellung von Arbeitspapieren, Techniken und Veröffentlichungen, den Bau von Geräten und die Übernahme der Ergebnisse durch BMWi, Euratom und IAEO.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Safeguards-Web-Portal: Realisierung des Konzeptvorschlags.
- Geologische Endlagerung: Planung und Beginn eines geophysikalischen Messprogramms; Durchführung einer Studie zum Einsatz der Radarfernerkundung zur Überwachung von geologischen Endlagern.
- Datenfernübertragung: Planung eines Feldtests zur Datenfernübertragung von State-of-Health-Daten in Abstimmung mit Euratom, den Betreibern, dem BMWi und den BSI.

- ESARDA: Mitarbeit in den Arbeitsgruppen „Containment and Surveillance“, „Verification Technologies and Methodologies“, „Training and Knowledge Management“ und der „Reflection Group“, Mitarbeit in und Leitung der Arbeitsgruppe „Implementation of Safeguards“; Mitarbeit im Steering und Editorial Committee.
- Safeguardstechniken: Projektleitung bei der Entwicklung von NGSS, DMCA, HM-5 Software, bei der Machbarkeitsstudie LIBS
- Satellitenfernerkundung: Projektleitung zweier Studien zum Einsatz der Fernerkundung in der IAEO.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von „State-level Safeguards“ und „Acquisition Path Analysis“.
- AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis: Mitarbeit in den safeguardsbezogenen Gremien und Teilnahme an den Sitzungen.
- Standing Advisory Group on Safeguards Implementation (SAGSI): Beratende Begleitung des neuen SAGSI-Mitglieds.
- Zusatzprotokoll und Implementierung von Integrated Safeguards: Unterstützung und Beratung von Betreibern; Unterstützung des BMWi bei Anfragen von IAEO und Euratom; Erstellung der Deklaration für Deutschland nach dem Zusatzprotokoll; Erstellung von Vorlagen zur Einführung von Integrated Safeguards für spezielle Anlagen; Teilnahme an Besprechungen; Kommentierung von Entwürfen/Vorlagen Dritter.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Auskünfte zu Anfragen des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Wissenschaftliche Beiträge, Teilnahme an der Veranstaltung „The Importance of Using Game Theoretical Methods for IAEA Safeguards“ am 22. Juni bei der IAEO in Wien.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Expertensitzung bei der DGAP zu den Themen Russlands Nichtverbreitungspolitik, elektronische Kriegsführung und Nichtverbreitung sowie iranisches Nuklearprogramm (14.04.2011).
- Training: Durchführung eines Trainings von IAEO- und Euratom-Inspektoren im FZJ.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Safeguards-Web-Portal: Realisierung des Konzeptvorschlags.
- Geologische Endlagerung: Fortsetzung des Messprogramms im Erkundungsbergwerk Gorleben; Fortsetzung der Studie zum Einsatz der Radarfernerkundung zur Überwachung von geologischen Endlagern.
- Datenfernübertragung: Realisierung des Feldtest für die Datenfernübertragung von State-of-Health-Daten.
- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA-Arbeitsgruppen und -Gremien.
- Safeguardstechniken: Projektabschluss für NGSS, Weiterführung von DMCA, HM-5 Software, LIBS, ES.
- Satellitenfernerkundung: Projektleitung zweier Studien zum Einsatz der Fernerkundung bei der IAEO.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von „State-level Safeguards“ und „Acquisition Path Analysis“.
- Mitarbeit in den nationalen Gremien AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis.
- SAGSI: Beratende Begleitung des neuen SAGSI-Mitglieds.
- Unterstützung des BMWi bei der Umsetzung des Zusatzprotokolls und der Einführung und Bewertung von Integrated Safeguards.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Beratung des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Ausarbeitung von wissenschaftlichen Beiträgen zur spieltheoretischen sowie quantitativen Analyse für die INMM Jahrestagung und des ESARDA/INMM-Workshops.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: DGAP-Expertensitzungen.
- Training: Durchführung eines Safeguards-Seminars für deutsche Anlagenbetreiber im FZJ mit Euratom.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Beiträge in Proc. 33rd ESARDA Annual Meeting, Budapest, 16.-20. Mai 2011

- Avenhaus, R., Shelev, V.M.; The Early Years of International Safeguards – Lessons to be remembered.
- Brutscher, J., Birnbaum, A., Keubler, J., Jung, S., Koestlbauer, M., Dürr, M., Richter, B., Schwalbach, P., von Zweidorf, A., Berndt, R.; Design and Performance of the Digital Upgrade of the Mini Multi-Channel Analyser (DMCA).
- Fricke-Begemann, C., Noll, R., Monteith, A., Maddison, A., Dürr, M.; Feasibility-Study on Laser-Induced Breakdown Spectroscopy for Pre-Screening of Environmental Samples.
- Jussofie, A., Reznicek, A., van Bevern, K.; Implementation of Integrated Safeguards in Germany.
- Listner, C., Niemeyer, I.; Object-based change detection using very high-resolution satellite data.
- Minet, C., Eineder, M., Niemeyer, I.; High Resolution Radar Satellite Imagery Analysis for Safeguards Applications.
- Niemeyer, I., Stein, G., Reznicek, A., Dürr, M., Remagen, H.H.; Some Thoughts on State Level Safeguards.
- Richard, M.J., Stein, G., Bril, L-V., Avenhaus, R.; The ESARDA Verification Technologies and Methodologies Working Group: Addressing Verification Challenges Globally

2.4 BMWi-Hausvorhaben

Zuwendungsempfänger: Projektträger Karlsruhe im Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: KWA 9005
Vorhabensbezeichnung: Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2011 bis 31.12.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2011 bis 30.06.2011	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.101.993,00 EUR	Projektleiter: Dr. Pitterich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Entsorgungskonzept der Bundesregierung sieht die Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen vor. Von 2007 bis 2010 werden mit höchster Priorität FuE-Arbeiten zu offenen Fragestellungen der Endlagerung im Steinsalz durchgeführt. Parallel dazu soll der wissenschaftlich-technische Kenntnisstand zur Endlagerung Wärme entwickelnder Abfälle in Tonsteinen auf einen möglichst hohen Stand gebracht werden. Fragestellungen zur Endlagerung in kristallinen Gesteinen werden ergänzend bearbeitet, der Schwerpunkt liegt auf FuE-Arbeiten zum Technischen Barriersystem (Engineered Barrier Systems).

Der überwiegende Teil dieser Untersuchungen wird im Rahmen internationaler Projekte in Untertagelabors in Schweden, der Schweiz und Frankreich durchgeführt. Ferner soll die Erweiterung des Kenntnisstands zu Endlagersystemen in alternativen Wirtsgesteinen durch die Unterstützung von Kooperationen auf der Basis bzw. in Anlehnung an bestehende WTZ-Abkommen, wie z. B. mit Russland, erfolgen.

Das Vorhaben hat zum Ziel Arbeiten deutscher Wissenschaftler, die im Rahmen internationaler Forschungsprogramme (z. B. Schweden, Schweiz, Frankreich) arbeiten, zu koordinieren und zu intensivieren.

Die von BMWi geförderten Vorhaben werden ausführlicher in den formalisierten Zwischenberichten in Kapitel 2.1 beschrieben. Die BGR und das KIT/INE beteiligen sich an Projekten in den URLs überwiegend auf der Basis ihrer jeweiligen Haushalts- bzw. Institutsmittel.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

FuE-Arbeiten zu Hartgesteinen/Granit im Felslabor Grimsel und im HRL Äspö

(Vorhaben 02E9944, 02E10618, 02E10669, 02E10679, KIT/INE, BGR)

FuE-Arbeiten zu Tonstein in den Untertagelabors Mt. Terri, Tournemire und Bure

(Vorhaben 02E9894, 02E10086, 02E10377, 02E10618, KIT/INE, BGR)

Schwerpunkte der Arbeiten, die sowohl In-situ-, Labor-Untersuchungen und Modellierungsarbeiten umfassen, betreffen Untersuchungen zur Migration, zum Transport und zur Rückhaltung kolloidaler und gelöster Radionuklidspezies in den technischen und natürlichen Barrieren, Untersuchungen an technischen Verschlussmaterialien (EBS) sowie Entwicklung und Test numerischer Modelle, zur Beschreibung von THM(C)-Prozessen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Vorhaben sind eingebunden in internationale Projekte und wurden bzw. werden zum Teil von der Europäischen Kommission im Rahmen des FP7 kofinanziert. Innerhalb der Vorhaben wurden Arbeiten mit Bezug zu folgenden Projekten ausgeführt:

Hartgestein/Granit

Felslabor Grimsel (CFM); HRL Äspö (Projekte: Prototype Repository, EBS Task Force, Temperature Buffer Test, Microbe, LASGIT, Alternative Buffer Materials)

- Weiterentwicklung und Anwendung von Methoden zur Messung des Aufsättigungsverhaltens des technischen Barriersystems, Ermittlung der physikalischen und chemischen Parameter sowie Einsatz in gekoppelten numerischen Modellen
- Numerische Modellierung und Laboruntersuchungen zum THM-Verhalten von Buffermaterialien
- In-situ- und Labor-Untersuchungen zum Transport und zur Ausbreitung von Aktiniden im Gebirge unter dem Einfluss von Kolloiden und Mikroben

Tonstein

Bure (Teilnahme am Versuchsprogramm der ANDRA), Mont Terri (SB-Experiment)

- Ermittlung relevanter, zur Beschreibung des Materialverhaltens erforderlicher Gesteinsparameter
- Entwicklung von Modellen zur Simulation von gekoppelten THM-Prozessen
- Weiterentwicklung der Methoden zur Messung der thermischen und hydraulischen Effekte auf das Wirtsgestein

Die Ergebnisse sind in den jeweiligen Vorhaben dokumentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die in den Vorhaben vorgesehenen Untersuchungen sind aus den Berichten in Kapitel 2.1 zu ersehen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Siehe Berichte zu den einzelnen Vorhaben in Kapitel 2.1.

3 Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen

- | | |
|---|--|
| Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Fahrenbergplatz, 79098 Freiburg | |
| 02 E 10306 | Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse 📖 34 |
| Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover | |
| 02 E 10910 | Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS 📖 124 |
| DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine | |
| 02 E 10086 | Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon- 📖 18 |
| 02 E 10639 | Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtsformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA) 📖 68 |
| 02 E 10649 | Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) 📖 70 |
| 02 E 10729 | Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA) 📖 86 |
| 02 E 10730 | Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager 📖 88 |
| 02 E 10760 | Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsausgabe zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein - Kurztitel: URSEL 📖 94 |
| 02 E 10900 | Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS 📖 122 |
| 02 E 10931 | Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA-(TV2) 📖 128 |
| Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz | |
| 02 E 10810 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel) 📖 104 |
| Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (FZD), Bautzner Landstraße 400 (B6), 01328 Dresden | |
| 02 E 10156 | Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton 📖 20 |

02 E 10528 Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2  50

02 E 10618 Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden  66

Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungsstelle Leipzig - Interdisziplinäre Isotopenforschung, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig

02 E 10176 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Beiträge zur Modellierung des Actinidentransports in potentiellen Wirtsgesteinsformationen; Teilthema 1: Mobilitätsbestimmende Elementarprozess; Teilthema 2: Einfluss heterogener Strukturen auf den Lösungs-Kolloidtransport  24

02 E 10790 Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  100

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

02 E 10780 Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  98

02 W 6259 Neu- und Weiterentwicklung von Safeguards-Techniken und -methoden  142

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

02 E 10578 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP3 - Kurztitel: A-DuR  60

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

02 C 1628 Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Phase 2, Kurztitel: WeDa-II  136

02 C 1638 Bentonit als Barrierematerial für den Abschluss von Untertagedeponien - Abschließende Versuche und eine Zusammenstellung von Wissenschaft und Technik (Kurztitel: Bentonit-Barrieren)  138

02 E 9894 Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptprojekt  12

02 E 9944 Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2  14

02 E 10075 Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90  16

02 E 10336 Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t  38

02 E 10367 Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen  40

- 02 E 10377 Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen  42
- 02 E 10518 Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1  48
- 02 E 10538 Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen - Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit  52
- 02 E 10548 Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern  54
- 02 E 10558 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP1 - Kurztitel: A-DuR  56
- 02 E 10608 Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa  64
- 02 E 10669 Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2  74
- 02 E 10689 Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS  78
- 02 E 10719 Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)  84
- 02 E 10740 Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager  90
- 02 E 10750 Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsausage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein - Kurztitel: URSEL  92
- 02 E 10770 Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  96
- 02 E 10890 Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS  120
- 02 E 10941 Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL  130
- 02 E 10951 Diffusion in kompaktiertem Salzgrus – DIKOSA  132

Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig

- 02 E 10588 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP4 - Kurztitel: A-DuR  62

IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Deponietechnik Wilsnack & Partner, Lessingstr. 46, 09599 Freiberg

- 02 E 10447 Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilität  46

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

- 02 E 10659 Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge  72
- 02 E 10830 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)  108

Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz

- 02 E 10166 Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein  22

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

- 02 E 10326 Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Modellierung des Wärmetransports und Modellierung freier Oberflächen  36
- 02 E 10568 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP2 - Kurztitel: A-DuR  58

Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover

- 02 E 10850 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)  112

Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Straße 173, 79100 Freiburg

- 02 E 10870 Instrumente, Bedarf und Potentiale für Wissensmanagement in der Endlagerforschung  116

Projektträger Karlsruhe Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen

- KWA 9005 Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine  146

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

- 02 E 10206 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere  30
- 02 E 10679 Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2  76
- 02 E 10699 Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt FZK: Thermodynamische Datenbasis für Radionuklide  80
- 02 E 10800 Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  102
- 02 E 10840 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehenswei-  110

sen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)

Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg

- 02 E 10709 Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt TUBAF: Ozeanische Salze und Carbonate  82
- 02 E 10880 Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Baustoffs  118
- 02 E 10921 Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA- (TV1)  126

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

- 02 E 10860 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)  114

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

- 02 E 10820 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)  106

Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden

- 02 E 10417 Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Komplexbildung und Sorption dreiwertiger Actinide Am(III), Pu(III) im System Actinid-NOM-natürliches Tongestein-Aquifer  44

Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München

- 02 E 10186 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexbildung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien  26

Universität des Saarlandes, Campus Saarbrücken, 66123 Saarbrücken

- 02 E 10196 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Untersuchungen zur Migration von Lanthaniden und Uran in natürlichen Tonformationen im Übergang von verdünnten Mineral-Suspensionen zu kompakten Tonen  28

Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam

- 02 E 10216 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Spektroskopische Untersuchungen zum erweiterten Prozessverständnis in binären und ternären Huminstoff-Tongestein - Lanthanoid Systemen: Thermodynamische und kinetische Kenngrößen  32