

Forschungszentrum Karlsruhe in der Helmholtz-Gemeinschaft

PTE Nr. 37

Bericht über die im ersten Halbjahr 2009
vom BMBF und BMWi geförderten FuE-Arbeiten zur
„Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formatio-
nen“

Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe
Wassertechnologie und Entsorgung
(PTKA-WTE)

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
September 2009

PTE-Berichte

Der vorliegende Bericht dient der aktuellen Unterrichtung der Forschungsstellen, die im Rahmen des Förderkonzeptes „Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen“ FuE-Arbeiten durchführen sowie der zuständigen Behörden.

Die im Rahmen des Förderkonzeptes „Stilllegung/Rückbau kerntechnischer Anlagen“ durchgeführten FuE-Arbeiten werden ab 2001 in einer gesonderten Fortschrittsbericht-Reihe (S-Berichte) zusammengestellt.

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

Vorwort

Die Forschungszentrum Karlsruhe GmbH betreut im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) als Projektträgerschaft 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 Forschungszentrum 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	BMBF Referat 724
Kernmaterialüberwachung	BMWi Referat III B4

Der vorliegende Projektfortschrittsbericht 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“,
- 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
1.4	<i>Sicherheitsforschung für Bergbauregionen - Prozessanalyse und Prognosewerkzeuge für Bergschadensgebiete</i>	11
2	Formalisierte Zwischenberichte	13
2.1	E-VORHABEN	13
2.2	C-VORHABEN.....	141
2.3	W-VORHABEN.....	213
2.4	BMWl-HAUSVORHABEN.....	217
3	Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen.....	221

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

1 Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen

1.1 Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche

02 C 1064	Weiterentwicklung eines TDR-Messverfahrens zur Quantifizierung von Feuchte- und Dichteverteilungen in Bentonitversuchsbauwerken	Materialforschungs- und prüfanstalt an der Bauhaus-Universität, Weimar	📖 144
02 C 1204	Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leicht löslichen Salzgestein (Carnallit); Teil 2: Erprobung von Funktionselementen in situ	GTS Grube Teutschenthal Sicherungs GmbH & Co. KG	📖 146
02 C 1335	Qualifizierung von Strömungsbarrieren in Salzformationen, Phase 1 bis Phase 4	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 160
02 C 1395	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 1	K-UTEK Salt Technologies, Sondershausen	📖 164
02 C 1405	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 2	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 166
02 C 1415	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 3	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 168
02 C 1426	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 170
02 C 1436	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD	Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 172
02 C 1446	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben TU BAF	TU Bergakademie Freiberg	📖 174
02 C 1456	Bestimmung der Änderung des räumlichen und zeitlichen Ausbreitungsverhaltens von chemotoxischen Schwermetallen nach Wechselwirkung mit Natural Organic Matter (NOM) in geologischen Formationen von Untertagedeponien	Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig	📖 176

02 E 9854	Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern, Machbarkeitsstudie und Entwurfs- und Konzeptplanung (DENKMAL, Phase 1)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 14
02 E 10045	Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 24
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	📖 30
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 Wirtsfornation -TemTon-	DBE Technology GmbH, Peine	📖 32
02 E 10669	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 136
02 E 10679	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2	Forschungszentrum Karlsruhe GmbH	📖 138
KWA 9003	Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine	Forschungszentrum Karlsruhe GmbH	📖 218

1.2 Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse

02 C 0922	Verschlussystem mit Äquipotenzialsegmenten für die untertägige Entsorgung (UTD und ELA) gefährlicher Abfälle zur Sicherstellung der homogenen Befeuchtung der Dichtelemente und zur Verbesserung der Langzeitstabilität	Universität Karlsruhe (TH)	📖 142
02 C 1244	Prognose der Redoxeigenschaften natürlicher wässriger Lösungen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 148
02 C 1254	Geochemische Barriereeffizienz im anaeroben Depositionsfeld einer UTD	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 150
02 C 1264	Beweissicherungsprogramm zum geomechanischen Verhalten von Salinarbarrieren nach starker dynamischer Beanspruchung und Entwicklung einer Dimensionierungsrichtlinie zum dauerhaften Einschluss	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 152
02 C 1275	Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt TUC: Gekoppelte Modellierung des C:HM Verhaltens von selbstverheilendem Salzversatz	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 154
02 C 1285	Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt GRS: Laborversuche und Geochemische Modellierung	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 156
02 C 1295	Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt Uni Tübingen: Validierung Numerischer Modelle für geochemische Prozesse in geotechnischen Dichtelementen	Eberhard-Karls-Universität Tübingen	📖 158
02 C 1355	Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des druckbetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht permeables Barrierengebirge (Salinar)	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 162
02 C 1577	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1	Dr. Andreas Hampel, Mainz	📖 198

02 C 1587	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 200
02 C 1597	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3	Forschungszentrum Karlsruhe GmbH	📖 202
02 C 1607	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 4	Leibniz Universität Hannover	📖 204
02 C 1617	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 206
02 C 1628	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung - Phase 2, Kurztitel: WeDa-II	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 208
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	📖 210
02 E 9894	Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineralgemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptprojekt	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 16
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	📖 18
02 E 9995	Grundlegende Prozesse zum Radionuklidtransport im Fernfeld eines Endlagers im Salz - FUNMIG-RTDC-5	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 20
02 E 10015	Untersuchungen zum Gastransport in der Auflocke- rungszone in einem geologischen Endlager in Tonge- stein	Technische Universi- tät Darmstadt	📖 22
02 E 10055	Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL	Gesellschaft für An- lagen- und Reaktor- sicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 26
02 E 10065	Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL	DBE Technology GmbH, Peine	📖 28

02 E 10116	Barriereintegrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs in Tonformationen (BET)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 34
02 E 10126	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZ Karlsruhe	Forschungszentrum Karlsruhe GmbH	📖 36
02 E 10136	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD	Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 38
02 E 10146	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 40
02 E 10156	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton	Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 42
02 E 10166	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein	Johannes Gutenberg-Universität Mainz	📖 44
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	Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig	📖 46
02 E 10186	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien	Technische Universität München	📖 48
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	📖 50
02 E 10206	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere	Forschungszentrum Karlsruhe GmbH	📖 52
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	📖 54
02 E 10236	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 56

02 E 10246	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 58
02 E 10256	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 60
02 E 10276	Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM-	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 62
02 E 10296	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Visualisierung und Datenanalyse	Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn	📖 64
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	📖 66
02 E 10316	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen	Friedrich-Schiller-Universität Jena	📖 68
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	📖 70
02 E 10336	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 72
02 E 10357	Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern	Forschungszentrum Jülich GmbH	📖 74
02 E 10367	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 76
02 E 10377	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 78
02 E 10387	Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 80
02 E 10397	Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX	Öko-Institut e.V., Institut für angewandte Ökologie, Freiburg	📖 82
02 E 10407	Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX	DBE Technology GmbH, Peine	📖 84

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	📖 86
02 E 10427	Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 88
02 E 10437	Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen	Bauhaus-Universität Weimar	📖 90
02 E 10447	Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung	IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Deponietechnik Wilsnack & Partner, Freiberg	📖 92
02 E 10457	Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag	TU Bergakademie Freiberg	📖 94
02 E 10467	Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT	Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec), Garching	📖 96
02 E 10477	Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 98
02 E 10487	Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm	DBE Technology GmbH, Peine	📖 100
02 E 10498	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz (Vorprojekt) – Kurztitel: VIRTUS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 102
02 E 10508	Machbarkeitsstudie zur Vorbereitung eines 2-Bohrloch-Erhiterversuches im URL Mont Terri, Schweiz „MACH-2“	DBE Technology GmbH, Peine	📖 104
02 E 10518	Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 106
02 E 10528	Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2	Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 108
02 E 10538	Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen - Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 110
02 E 10548	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 112

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	📖 114
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	📖 116
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	📖 118
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	📖 120
02 E 10598	Externer unabhängiger Review des im Vorhaben Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW (ISIBEL) erstellten FEP-Katalogs	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 122
02 E 10608	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 124
02 E 10618	Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden	Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 126
02 E 10628	Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case	Öko-Institut e.V., Institut für angewandte Ökologie, Freiburg	📖 128
02 E 10639	Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtsfeldern und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 130
02 E 10649	Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 132
02 E 10659	Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 134

1.3 Kernmaterialüberwachung

02 W 6243 Institutionelle und technologische Weiterentwicklung von internationalen Kernmaterialkontrollen **Forschungszentrum Jülich GmbH**  214

1.4 Sicherheitsforschung für Bergbauregionen - Prozessanalyse und Prognosewerkzeuge für Bergschadensgebiete

02 C 1466	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrogeologie und Geochemie des Gesamtsystems	Brandenburgische Technische Universität Cottbus	📖 178
02 C 1476	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 2 (BGR): Geophysikalische Untersuchungen, Seismische Erkundung, Geologisches 3D-Modell, Bohrungen, Server-Datenbank, Koordination des Gesamtvorhabens	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	📖 180
02 C 1486	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung	Technische Universität Clausthal	📖 182
02 C 1496	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTECH): Grundlagen für Geomodellierung	K-UTECH AG Salt Technologies, Sondershausen	📖 184
02 C 1506	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 5 (IHU): Erfassung, Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie	IHU Geologie und Analytik Gesellschaft für Ingenieur-Hydro- und Umweltgeologie mbH, Stendal	📖 186
02 C 1516	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung	DHI-WASY GmbH, Berlin	📖 188
02 C 1526	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 7 (JoGU): Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität	Johannes Gutenberg-Universität Mainz	📖 190
02 C 1536	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen	Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig	📖 192

- 02 C 1546** Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 9 (GGA-S1): Deckgebirgseigenschaften über einem bergbaubedingt destabilisiertem Untergrund, abgeleitet aus seismischen Beobachtungen **Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik (LIAG), Hannover**  194
- 02 C 1556** Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen **Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik (LIAG), Hannover**  196

2 Formalisierte Zwischenberichte

2.1 E-Vorhaben

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 9854
Vorhabensbezeichnung: Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern, Machbarkeitsstudie und Entwurfs- und Konzeptplanung (DENKMAL)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2004 bis 30.06.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.158.876,00 EUR	Projektleiter: Filbert	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Vorhabens ist die Entwicklung und die Erprobung eines technisch machbaren Konzeptes zur Endlagerung gezogener Brennstäbe aus unzerschnittenen Brennelementen in vertikale Bohrlöcher. In der Phase 1 soll durch eine Machbarkeitsanalyse untersucht werden, unter welchen Randbedingungen der vollständige Zyklus der Einlagerung von mit unzerschnittenen Brennstäben beladenen Kokillen erfolgen kann. Untersucht werden sollen der Transport über Tage, die Schachtförderung, der Transport unter Tage und letztendlich die Einlagerung in einem vertikalen Bohrloch. Daraus sollen Anforderungen an die Komponenten zur Einlagerung erarbeitet, notwendige Untersuchungsschwerpunkte herausgestellt und ein technisches Konzept abgeleitet werden. Die Phase 1 schließt nach der Konzeptplanung mit einer Entwurfsplanung zum ausgewählten Konzept ab. In der Phase 2 werden die Versuchskomponenten bis zur Ausführungsreife geplant, gefertigt und zusammen mit der vorhandenen Komponente Einlagerungslokomotive für den Demonstrationsversuch bereitgestellt. Im Einzelnen soll dabei die technische Machbarkeit nachgewiesen, die Sicherheit in der Betriebsphase durch hinreichend viele Demonstrationsversuche überprüft und Ableitungen für die Sicherheit in der Nachbetriebsphase getroffen werden. Darüber hinaus soll die Einlagerung eines weiteren Endlagergebundes - bestehend aus 3 HAW-Kokillen - gestestet werden. Weiterhin soll geklärt werden, mit welcher Belastung aus dem Gebirge die eingelagerten Kokillen während der Betriebsphase in einem gefüllten Einlagerungsfeld maximal beaufschlagt werden. Ein Dokumentationsfilm über die Demonstrationsversuche wird erstellt. Im Rahmen einer Vorhabensergänzung erfolgt die Planung, Fertigung und der Test eines Lastabtragselementes zur mechanischen Trennung der Kokillen im Bohrloch sowie von Verfüllkomponenten zum Nachweis der Versetzbarkeit einer eingelagerten Kokille mit Salzgrus. Das Vorhaben wird durch die EU und die deutsche kerntechnische Industrie mitgefördert und ist im Rahmen des 6. EU-Rahmenprogramms (2002 – 2006) in das integrierte Projekt IP ESDRED (Engineering Studies and Demonstration of Repository Designs) eingebunden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

„Phase 1“ des Vorhabens:

- AP1: Grundlagenermittlung
- AP2: Konzeptplanung
- AP3: Entwurfsplanung

„Phase 2“ des Vorhabens:

- AP4: Ausführungsplanung
- AP5: Fertigung der Komponenten
- AP6: Versuchsdurchführung
- AP7: Planung und Durchführung von Demonstrationsversuchen mit einer HAW-Kokille und 3 HAW-Kokillen in einem Overpack (Triple-pack)

- AP8: Untersuchungen zur thermomechanischen Belastung der BSK 3 im Einlagerungsbohrloch
 AP9: Dokumentation der Demonstrationsversuche durch Film-/Videoaufnahmen
 AP10: Erprobung des Versatzes einer BSK 3 bei der Bohrlochlagerung mit Salzgrus
 AP11: Versuchsauswertung und Abschlussbericht.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP5: Die endgültige Abnahme der Einlagerungsvorrichtung steht weiterhin aus.
 AP6: Im Rahmen der Versuchsdurchführung wurden 1.000 (500 Doppelzyklen) Einlagerungsvorgänge mit der Brennstabkokille sowie 120 Einlagerungsvorgängen mit dem Triple-pack (60 Doppelzyklen) durchgeführt. Während der Versuchsdurchführung trat kein relevanter „zufälliger Ausfall“ auf. Weiterhin wurden erfolgreich durchgeführt:
- Streckentransport der Einlagerungsvorrichtung aufgesetzt auf dem Plateauwagen
 - Wiedereingleisen eines beladenen Plateauwagens nach simuliertem Entgleisen
 - Notbetätigung der Schleusen im Handbetrieb
 - Versatz der Brennstabkokille mit Salzgrus.
- AP7: Trotz Durchmesserdifferenzen und anderer Schwerpunktlage konnten mit den 3 HAW-Kokillen in einem Overpack (Triple-pack) 120 Einlagerungsvorgänge (60 Doppelzyklen) erfolgreich durchgeführt werden. Während der Versuchsdurchführung trat kein relevanter „zufälliger Ausfall“ auf.
 AP8: Die Untersuchungen zur thermomechanischen Belastung der BSK 3 im Einlagerungsbohrloch wurden fortgeführt.
 AP9: Die Dokumentation der Demonstrationsversuche durch Film-/Videoaufnahmen wurde fortgeführt.
 AP10: Die Versatzkomponenten und das Lasttragelement wurden gebaut und erfolgreich eingesetzt. Die schräg stehende BSK 3 wurde durch das Salz fast vollständig umschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Versuchsdurchführungen
- Abnahme der Einlagerungsvorrichtung
- Rückbau des Versuchsstandes
- Auswertung und Erstellung Abschlussbericht

5. Berichte, Veröffentlichungen

STATUS OF EQUIPMENT DEVELOPMENT FOR A HIGH-LEVEL WASTE REPOSITORY IN GERMANY

E. Biurrun, B. Haverkamp, W. Filbert, W. Bollingerfehr - DBE TECHNOLOGY GmbH, Peine, Germany
 R. Graf - GNS - Gesellschaft für Nuclear-Service mbH, Essen, Germany, WM2009 Conference, March 1-5, Phoenix, Arizona, USA 2009.

STATUS DER ARBEITEN ZUM ENDLAGERKONZEPT DIREKTE ENDLAGERUNG ABGEBRANNTER BRENNSTÄBE IN BRENNSTABKOKILLEN (BSK)

W. Filbert, J. Wehrmann, W. Bollingerfehr - DBE TECHNOLOGY GmbH, Peine
 R. Graf, S. Fopp - GNS Gesellschaft für Nuklear-Service mbH, Essen, Jahrestagung Kerntechnik 2009.

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 31.03.2010		Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.574.783,00 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 bis 6 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 Verdichtetechniken werden in einem Technikum in Braunschweig entsprechende Vorversuche durchgeführt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

Nachdem beim Technikumsversuch 2 nach Beendigung der Wasserinjektion keine Änderung des Porendrucks und des Quelldrucks mehr auftrat, wurden die Untersuchungen mit der Bestimmung des Gaseintritts- bzw. Durchbruchdrucks am 07.01.2009 fortgesetzt. Beginnend mit einem Gasinjektionsdruck von 0,25 MPa wurde der Druck bis 1,35 MPa stufenweise erhöht, wobei ein Gaseintritt mit Wasserverdrängung aus der Probe bereits bei dem Startdruck von ca. 0,25 MPa identifiziert wurde. Die während der 22-wöchigen Versuchszeit durch das Gas aus dem Dichtelement verdrängte Wassermenge beläuft sich z. Z. auf ca. 2,52 l. Ein Gasaustritt war bisher noch nicht zu beobachten.

Die Wasserinjektion zur Aufsättigung der Dichtungen in den 4 Bohrungen BSB1 (35/65 Ton-Sand, Dichtungslänge 1 m), BSB2 (35/65 Ton-Sand, Dichtungslänge 1 m), BSB13 (Nagra-Material, gebrochene Tonpellets, Dichtungslänge 0,5 m) und BSB15 (50/50 Ton-Sand, Dichtungslänge 0,5 m) dauern an. Im Vergleich zum bisherigen Versuchsablauf sind keine signifikanten Änderungen aufgetreten. Lediglich die bisher aufgenommenen Wassermengen haben sich verändert.

Die injizierte Wassermenge beläuft sich bei der Bohrung BSB1 auf 54,8 l bei der Bohrung BSB2 auf 101,9 l, bei der Bohrung BSB13 auf 21,6 l und bei der Bohrung BSB15 auf 79,8 l. Die im vorherigen Zwischenbericht angegebenen Fließraten sind konstant geblieben.

Für die Bohrung BSB1 kann bzgl. der Druckverläufe innerhalb der Dichtung keine Aussage getroffen werden, da wie bereits erwähnt, die entsprechenden Drucksensoren ausgefallen sind. Die unterhalb des Packers gemessenen Gesamtdruckverläufe, belaufen sich bei BSB2 auf 0,18 MPa sowie bei BSB15 auf 0,49 MPa und haben sich nahezu nicht erhöht. Bei der mit reinem Ton gefüllten Bohrung BSB13 nimmt der Gesamtdruck wie bisher stetig zu und liegt nun bei 2,8 MPa.

Mit Ablauf der Vertragsperiode am 31. Januar 2009 wurde das Integrierte EU-Projekt ESDRED, in dessen Rahmen eine Kofinanzierung des SB-Experimentes durch die Kommission der Europäischen Union stattfand, beendet. Die Übergabe des zugehörigen Abschlussberichtes (s. u.) erfolgte nach einer mit der KEG vereinbarten Überarbeitung des Berichtes zum 30. Juni 2009. In Abstimmung mit PTKA/BMWi wurde die Weiterführung des In-situ-Experiments bis zum Erreichen der Vollsättigung und Bestimmung der verbleibenden Gaspermeabilität vereinbart.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung des Technikumsversuchs mit Bestimmung der verbleibenden Gaspermeabilität; Ausbau des Dichtmaterials für Nachuntersuchungen
- Weiterführung der Aufsättigung der In-situ-Versuche und Ermittlung der Wasserpermeabilität sowie der Gaseintrittsdrücke mit verbleibender Gaspermeabilität
- Nachuntersuchung der erreichten Sättigung in allen Versuchen

5. Berichte, Veröffentlichungen

De Bock, C., Bosgiraud, J.-M., Breen, B., Johnson, M., Rothfuchs, T., Weber, H., Van Marcke, P., Verstricht, J., 2009: ESDRED, Deliverable 6 Module 1, Final Report, European Commission, June 2009

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: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
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.

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 gemessenen Resistivitätsverteilung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die Messungen der Resistivität im Versatz und im Gebirge wurden fortgesetzt.

Im Streckenversatz in Sektion I ist die Resistivitätsverteilung sehr homogen und hat sich auch im letzten Halbjahr nicht weiter erniedrigt. Bereits Mitte 2007 wurden überall im Messquerschnitt Werte unter $2 \Omega\text{m}$ (entspricht einem Wassergehalt von über 25 %) erreicht. Nach den Kalibriermessungen im Labor entspricht eine Resistivität unter $2 \Omega\text{m}$ Vollsättigung. In 2008 wurde allerdings eine leichte Resistivitätserhöhung festgestellt, insbesondere im oberen Bereich des Versatzes. Der Grund dafür ist noch unklar; die Messungen werden fortgesetzt. Im Streckenversatz in Sektion II ändert sich die Resistivität inzwischen nicht mehr, nachdem sie auf Werte um $3 \Omega\text{m}$ im Zentrum (Wassergehalt 21-22 %) und $2\text{-}3 \Omega\text{m}$ nahe der Tunnelwand gesunken ist. Damit ist auch hier der Versatz nahezu voll gesättigt.

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. Eine Klärung wird erst im Rahmen von Nachuntersuchungen 2010 möglich.

Die Resistivitätsverteilungen entlang der Messketten im Gebirge ähneln einander sehr und änderten sich bis Mitte 2006 kaum. Nahe den Elektroden werden 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 $7000 \Omega\text{m}$, was dem gesättigten Gebirge entspricht. Eine Widerstandserhöhung entlang der Messkette nahe dem Lagerbohrloch 4, die sich seit Mitte 2006 andeutete, baut sich inzwischen wieder ab. Möglicherweise handelt es sich um Sättigungsschwankungen des Betons zur Ankopplung der Elektroden und des umgebenden Gebirges.

AP2: Die Laborversuche zur Simulation der Versatzaufsättigung mit begleitender Geoelektrik wurden 2008 erfolgreich abgeschlossen. Wassergehaltsbestimmungen an Proben aus dem Prototype Repository können erst nach Aufwältigung der Sektion II erfolgen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung der In-situ-Messungen

AP2: Wassergehaltsbestimmungen an Proben aus dem Versuchsfeld (ab 2010)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 9995	
Vorhabensbezeichnung: Grundlegende Prozesse zum Radionuklidtransport im Fernfeld eines Endlagers im Salz – FUNMIG-RTDC-5			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche			
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2005 bis 31.05.2009		Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 31.05.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 169.825,00 EUR		Projektleiter: Dr. Noseck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Vorhabens soll das Verständnis zum geochemischen Verhalten von Schadstoffen in natürlichen Systemen und zum Einfluss von organischer Materie auf diese Prozesse erhöht werden. Schwerpunktmäßig soll das Verhalten organischer Materie und das geochemische Verhalten von Uran und anderen Spurenelementen unter Bedingungen, wie sie im Fernfeld von Endlagern in Salzformationen auftreten, charakterisiert und beschrieben werden.

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen des Projekts „Anwendung von Transportprogrammen auf die Nuklidmigration in natürlichen Gesteinsformationen mit Feldmessungen“ (FKZ 02E9551) auf und stellt den nationalen Beitrag zur Komponente RTDC-5 des integrierten EC-Projekts FUNMIG dar. Partner in dieser Komponente sind INE (Institut für Nukleare Entsorgung), NRI (Nuclear Research Institute), Czech Republic und University Helsinki, Finland.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Im ersten Arbeitsschritt sollen vom INE Kolloidmessungen am Standort Ruprechtov durchgeführt werden. Der Beitrag der GRS umfasst die Durchführung zeitgleicher Messungen des Eh- und pH-Werts mit einer In-situ-Sonde und Messungen der Grundwasserzusammensetzung in den entsprechenden Grundwassermessstellen am Standort Ruprechtov.

Im zweiten Arbeitsschritt soll mit modernen analytischen Methoden wie μ -XRF (INE) und U(IV)/U(VI)-Trennung (University Helsinki) der geochemische Zustand von Uran in natürlichen Sedimentproben vom Standort Ruprechtov mit einem hohen Urangehalt analysiert und charakterisiert werden. Der Beitrag der GRS besteht in der Identifikation und Verteilung geeigneter Proben und in der chemisch-mineralogischen Charakterisierung dieser Proben.

Der dritte Arbeitsschritt hat die Integration der Ergebnisse aus den beiden anderen Arbeitsschritten zusammen mit den bereits vorliegenden Daten zum Standort Ruprechtov zum Inhalt. Es soll eine möglichst genaue Beschreibung der Prozesse zum Verhalten von organischer Materie im Hinblick auf die Bildung von Huminkolloiden und auf das geochemische Verhalten

von Uran und anderen Spurenelementen in einem natürlichen System, das dem eines Deckgebirges über einem Salzstock ähnlich ist, erreicht werden. Als Task Leader des RTDCs ist GRS für die Koordination aller Arbeiten verantwortlich.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AS3: Fertigstellung des Beitrags für den EUR-Abschlussbericht und der übergreifenden Dokumentation mit Beiträgen aus anderen RTDCs zum Thema „Real system analyses and natural analogues“ für eine Sonderausgabe der Zeitschrift Applied Geochemistry.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine. Das Projekt endete am 31.05.2009.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Noseck U, Rozanski K, Dulinski M, Havlova V, Sracek O, Brassler Th, Hercik M, Buckau G (2008): Carbon chemistry and groundwater dynamics at natural analogue site Ruprechtov, Czech Republic: insights from environmental isotopes. Appl. Geochem. doi: 10.1016/j.apgeochem.2009.05.007.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt		Förderkennzeichen: 02 E 10015
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen zum Gastransport in der Auflockerungszone in einem geologischen Endlager in Tongestein		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2005 bis 31.10.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 500.312,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Hampe	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Untersuchung und Quantifizierung der transportrelevanten Parameter in einem geologischen Endlager in Tongestein zur Beurteilung der Vorgänge in der Auflockerungszone nach deren Wiederaufsättigung und Gasbildung in den Einlagerungsräumen. Es wird untersucht, unter welchen Bedingungen Korrosions- und Degradationsgase das in den Rissen und Poren vorhandene Formationswasser verdrängen können, und ob sich dadurch wieder Wegsamkeiten bilden können. Untersuchung der Beeinflussung der Selbstabdichtungsfähigkeit von Opalinston durch die Interaktion von Zementwasser mit Tonstein.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Erstellung der detaillierten Versuchsmatrix und Festschreibung der Variationsbandbreiten der Untersuchungsparameter.
- Modifikation vorhandener Versuchseinrichtungen. Die aus vorlaufenden Projekten vorhandenen Versuchseinrichtungen müssen der geänderten Probengeometrie und den Versuchsbedingungen angepasst werden.
- Untersuchung der Riss- und Porengeometrie mittels unterschiedlicher Verfahren. Neben etablierten Verfahren sollen innovative Methoden zur Untersuchung der Porosität und der Porengeometrie eingesetzt werden.
- Untersuchungen zum Einfluss von alkalischem Formationswasser auf die Gas- und Flüssigkeitsmigration durch die Auflockerungszone
- Durchführung der zentralen Experimente zum Durchlässigkeitsverhalten und Gastransport. In Abhängigkeit von Überlagerungsdruck, Gas- bzw. Flüssigkeitseintrittsdruck pH-Wert und Temperatur werden Änderung von Permeabilität, Flüssigkeitsdurchbruch sowie Verdrängung von Flüssigkeit durch Gas untersucht.
- Auswertung, Bewertung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Fortführung der Untersuchungen zur Bestimmung der Transportporosität über instationäre Permeabilitätsmessungen und Vergleich mit den Simulationsrechnungen. Erstellung eines erweiterten Simulationsmodells mit Hilfe der FEM-Software COMSOL zur besseren Anpassung an reale Eintrittsfunktionen bei Drucksprüngen, Berücksichtigung von Rissen und Anisotropien in Proben und Vergleich des bisher angewandten Darcy-Modells mit Modellen zur Stofftransportbeschreibung nach Forchheimer und Brinkman.
- Einbau und vermessen einer Probe, die seit ihrer Erbohrung vor ca. 3 Jahren unter einem Druck von 20 bar gelagert wurde. Bezüglich der Gasdurchlässigkeit zeigte sich kein Unterschied zu den Proben, die gasdicht ohne Überlagerungsdruck gelagert wurden. Die Messungen mit Formationswasser sind noch nicht abgeschlossen.
- Verbesserung des experimentellen Aufbaus bzgl. der Überlagerungsdruckaufgabe zur Vermeidung von Leckströmen.
- Beginn eines Aufsättigungsversuchs einer orthogonal zur Schichtung angeströmten bergfeuchten Probe bei einer Temperatur von $T = 60 \text{ °C}$. Als erstes Zwischenergebnis werden bei einem Überlagerungsdruck von 1 MPa Permeabilitäten von $k < 10^{-22} \text{ m}^2$ ermittelt.
- Durchführung von Vorversuchen zur Herstellung von alkalischem Formationswasser mit Beton aus Portlandzement und Zuschlagstoffen und synthetischem Formationswasser. Abhängig von der Betonaushärtzeit und dem Masseverhältnis Beton /Formationswasser wurden pH-Werte zwischen $\text{pH} = 11$ und $\text{pH} = 13$ realisiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Durchlässigkeitsuntersuchungen bei höheren Temperaturen.
- Weiterführung der laufenden Untersuchungen zum Gasdurchbruch nach Probenaufsättigung und Wiederbeaufschlagung mit Gas.
- Fortführung der stationären und instationären Permeabilitätsversuche sowie der Simulationsrechnungen zur Bestimmung der Transportporosität.
- Fortführung der Zementwasser-Vorversuche und Standardisierung des Verfahrens zur Zementwasserherstellung in Kooperation mit NAGRA.
- Durchströmversuche mit alkalischem Permeat.
- Fortführung der Detailauswertung und abschließende Auswertung und Bewertung der Ergebnisse.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10045
Vorhabensbezeichnung: Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2005 bis 30.09.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 828.660,00 EUR	Projektleiter: Dr. Zhang	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zur Vorbereitung der Errichtung eines Endlagers für radioaktive Abfälle in einer Tonsteinformation hat die französische Endlagerorganisation ANDRA im Sommer 2000 mit der Errichtung eines Untertagelabors in der Callovo-Oxfordian Tonsteinformation am Standort Meuse/Haute Marne im Pariser Becken begonnen. In diesem Untertagelabor wird seit Ende 2004 ein Forschungsprogramm durchgeführt, um Kenntnisse über die Tonsteinformation zu gewinnen und ihre Eignung als Wirtsgestein für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle nachzuweisen. Eine vorläufige Standortbewertung muss dem französischen Parlament bereits im Jahr 2006 vorgelegt werden.

Im Rahmen eines Kooperationsvertrages zwischen ANDRA/CEA und BMWi besteht die Möglichkeit, sich an diesem Forschungsprogramm zu beteiligen und eigenes Know-how zur Endlagerung gefährlicher Abfallstoffe in geologischen Tonformationen aufzubauen. Das Ziel der Beteiligung besteht in der Vertiefung des Verständnisses gekoppelter THM-Prozesse im konsolidierten Tonstein und der Verifizierung entsprechender konstitutiver Modelle. Hierzu werden numerische Simulationen von In-situ-Experimenten und Laboruntersuchungen zur Bereitstellung der in den Modellen verwendeten Materialparameter durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: *Modellierung:* Zum besseren Verständnis der gekoppelten THM-Prozesse sowie zur Verifizierung der aktuell eingesetzten konstitutiven Modelle sind numerische Simulationen der Experimente REP und TER vorgesehen.

AP2: *Laboruntersuchungen:* Sie dienen der Charakterisierung des Tongesteins und der Ermittlung der in den konstitutiven Modellen verwendeten Materialparameter, mit deren Hilfe die *in situ* durchgeführten Experimente und Messungen verifiziert bzw. interpretiert werden. Folgende Untersuchungen sind vorgesehen: Ein- und dreiaxiale Kriechversuche, Quelldruckbestimmungen, Schädigungs- und Verheilungsverhalten, Fluidausbreitung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Laboruntersuchungen:

Im Rahmen des EU-TIMODAZ-Projekts erfolgten zwei zusätzliche ALZ-Simulationsversuche an großen Tonkernen aus dem Untertagelabor Bure, die mit einem Zentralbohrloch (D/d/L=280/100/520 mm) versehen waren, um die Entwicklung und Verheilung der Auflockerungszone um HAW-Einlagerungsbohrlöcher in einer Tonformation zu untersuchen. Von einem Gebirgsdruck von 15 MPa ausgehend wurde der Druck in der Zentralbohrung auf 1 MPa reduziert, um die Erstellung eines Einlagerungsbohrloches zu simulieren. Dabei wurde zwar eine Bohrlochkonvergenz deutlich, aber keine Erhöhung der Gaspermeabilität beobachtet. Zur Intensivierung der Materialschädigung wurde der Manteldruck bis zur Erzeugung eines Netzwerks von Rissen erhöht. Beim erhöhten Manteldruck von 24 MPa wurde eine deutliche Erhöhung der Gaspermeabilität von 10^{-21} m^2 auf 10^{-15} m^2 ermittelt. Anschließend erfolgte die Simulation des Zuflusses von Formationswasser durch Injektion einer synthetischen Bure-Ton-Lösung. Dabei wurde die einfließende Wassermenge gemessen. Nachfolgend wurde eine Aufheizphase zur Simulation der Wärmemission aus HAW durch Temperaturerhöhung auf 75 °C vorgenommen. Während der Aufheizphase wurden sowohl der Wasserzufluss als auch die Bohrlochkonvergenz beschleunigt. Die anschließende Abkühlung verlangsamte den Wassertransport und die Verformung. Bislang wurden insgesamt vier EDZ-Simulationsversuche an großen Tonkernen aus BURE-URL durchgeführt und damit die im TIMODAZ-WP3.3 vorgesehene Laborarbeit erfolgreich beendet. Die Ergebnisse werden den anderen Projektpartnern für die im TIMODAZ-WP5.2 vorgesehene Benchmark-Modellierung zur Verfügung gestellt.

Die langzeitigen Kriechversuche an 5 Tonproben wurden bei unterschiedlichen Belastungen von 1 bis 13 MPa über eine gesamte Zeitdauer von 3.3 Jahren weitergeführt. Seit Ende Mai wurde die letzte Spannungsstufe von 13 MPa auf 10 MPa reduziert.

Modellrechnungen:

Zur Vorbereitung der Benchmark-Modellierung sind die Stoffparameter durch Simulierung der GRS-Laborversuche kalibriert worden. Außerdem wurden die Daten eines EDZ-Simulationsversuchs den anderen Projektpartnern für die Kalibrierung der Stoffmodelle zur Verfügung gestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Modellierung eines EDZ-Simulationsversuchs
- Modellierung des In-situ-Experiments TER

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zwei Kurzfassungen sind für die Poster-Präsentationen anlässlich der EC-TIMODAZ-THERESA THMC Conference (29 Sep. – 01 Oct. 2009) abgeliefert worden:

- Zhang, C-L, Wieczorek, K, Rothfuchs, T, Armand, G, Lebon P: Responses of the Opalinus Clay to Heating during the HE-D Experiment at Mont-Terri
- Zhang, C-L: Self-sealing of Fractures in Argillites under Repository Conditions

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10055
Vorhabensbezeichnung: Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 31.03.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 779.960,00 EUR	Projektleiter: Dr. Wolf	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Die gemeinsame Bearbeitung durch BGR, GRS und DBE Technology soll eine ausgewogene und vollständige Betrachtung aller Instrumentarien gewährleisten. Sofern erforderlich, sollen zu Einzelfragen weitere Forschungseinrichtungen hinzugezogen werden.

In der zweiten Phase des Projekts wird der vorliegende Entwurf eines FEP-Katalogs von externen Reviewern begutachtet. Auf Basis der Begutachtung wird der FEP-Katalog überarbeitet. Die in der ersten Phase vorgeschlagene Vorgehensweise für die Szenarientwicklung soll überarbeitet und abgestimmt werden. In weiteren Arbeitspaketen werden Detailfragen bearbeitet, die in der ersten Phase nicht angesprochen wurden, deren Bearbeitung sich aber als wichtig herausgestellt hat.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das hier berichtete Untersuchungsprogramm bezieht sich auf die 2. Phase des ISIBEL-Projekts, die von Januar 2008 bis März 2010 läuft und neue Arbeitspakete umfasst.

AP1: Überarbeitung des FEP-Katalogs

AP2: Szenarientwicklung

AP3: *Definition und Bewertung des Isolationszustands „Sicherer Einschluss“*

AP4: *Behandlung von Unsicherheiten*

AP5: *Vorgehensweise bei einem Safety-Case-Konzept für ein HAW-Endlager im Salinar*

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Gespräche: Arbeitstreffen am 29.01., 11.03., 28.04., 29.04., 07.05., 10.06. und 22.06.2009

- AP1: Am 28. und 29. April fand bei der BGR in Hannover das erste Arbeitstreffen mit dem externen Reviewteam statt. Im Nachgang dieses Treffens wurde auf den Fragenkatalog des Reviewteams eine mit den Projektpartnern abgestimmte schriftliche Antwort ausgearbeitet.
Die Vereinheitlichung der FEP-Beschreibungen und deren Übertragung in die Datenbank wurden abgeschlossen.
- AP2: Es wurde ein Verfahren zur Ableitung eines Referenzszenarios festgelegt. Anwendung des Verfahrens auf der Grundlage des aktuellen FEP-Kataloges.
- AP3: Räumliche und zeitliche Festlegung der Grenzen des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs und Erarbeitung eines Entwurfs für eine realitätsnahe Definition des sicheren Einschlusses.
Durchführung deterministischer und probabilistischer Rechnungen zur Anwendung der festgelegten Kriterien zur Bewertung des sicheren Einschlusses.
- AP4: Zusammenstellung des internationalen Stands bei der Vorgehensweise zur Berücksichtigung von Unsicherheiten. Auf der Grundlage dieser Zusammenstellung wurde in Zusammenarbeit mit den Projektpartnern eine Vorgehensweise erarbeitet, mit der Unsicherheiten für ein HAW-Endlager in Salz dokumentiert werden können. Entwürfe der einzelnen Projektpartner liegen als Beiträge für eine entsprechende Dokumentation vor.
- AP5: Zu diesem AP wurden im ersten Halbjahr 2009 keine Arbeiten durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Zweites und abschließendes Review-Treffen mit dem externen Gutachter-Team am 11. und 12. August bei der BGR in Hannover. Nach Beendigung des externen Reviews des FEP-Katalogs Beginn mit der Überarbeitung der einzelnen FEP in der FEP-Datenbank.
- AP2: Fertigstellung der Beschreibung eines Referenzszenarios und gemeinsame Diskussion der Ergebnisse mit den Projektpartnern.
- AP3: Abschluss der Auswertungen der Modellrechnungen und Fertigstellung des Berichtes zum sicheren Einschluss.
- AP4: Diskussion und Zusammenstellung der Entwürfe. Fertigstellung des Berichtes zur Behandlung von Unsicherheiten.
- AP5: Fertigstellung des Berichtes zum Safety Case.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10065
Vorhabensbezeichnung: Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW – Kurztitel: ISIBEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.012.476,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krone	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Aufbauend auf dem erreichten Stand von Wissenschaft und Technik liegt das wesentliche Ziel des Vorhabens in der Vollständigkeit des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW. Die Phase II des FuE-Vorhabens ISIBEL knüpft unmittelbar an die Ergebnisse der Phase I des FuE-Vorhabens ISIBEL an und ist darauf gerichtet, wesentliche dort identifizierte Defizite bezüglich der Umsetzung des Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Salz zu beseitigen. Damit können wesentliche noch fehlende, methodische und wissenschaftlich-technische Grundlagen zur Verfügung gestellt werden, die für die Aufstellung eines Safety Case eingesetzt werden können. Die zur Erreichung dieses Zieles notwendigen Schritte, bzw. Teilziele, werden im Arbeitsprogramm systematisch abgebildet. Ziel des AP1 ist die Überarbeitung des im Rahmen der Phase I von ISIBEL entwickelten Entwurfes des FEP-Kataloges im Hinblick auf seine Transparenz und Nachvollziehbarkeit durch Einbindung eines externen Expertenreviews. Dieser FEP-Katalog bildet die Grundlage für eine erstmals durchzuführende vollständige Szenarientwicklung im AP2, um die zukünftigen Entwicklungen eines HAW-Endlagers im Salinar im Nachweiszeitraum von 1 Mio. Jahren zu beschreiben. Ein wesentliches Element des zugehörigen Sicherheitskonzeptes ist der Isolationszustand des sicheren Einschlusses, der Gegenstand der Arbeiten im AP3 ist, mit dem Ziel, hierzu eine fundierte Definition und geeignete quantifizierbare Indikatoren abzuleiten.

Ziel des AP4 ist es, für das im FuE-Vorhaben ISIBEL entwickelte Nachweiskonzept eine Analyse zu erwartender Ungewissheiten durchzuführen, Vorschläge für deren Behandlung zu erarbeiten bzw. zu überprüfen, inwieweit das Instrumentarium dafür zur Verfügung steht oder noch entwickelt werden muss. Im abschließenden AP5 soll aufbauend auf den Ergebnissen des FuE-Vorhabens ISIBEL und der vorangegangenen Arbeitspakete sowie unter Berücksichtigung internationaler Erfahrungen ein Vorschlag für die Struktur und die Inhalte eines Safety Case für ein HAW-Endlager im Salzgestein erarbeitet werden.

Obwohl die Arbeiten an Hand von möglichst konkreten geologischen und technischen Daten durchgeführt werden sollen, hat dieses FuE-Vorhaben die Intention, generell für ein technisch realisierbares Endlagerkonzept ein schlüssiges, nachvollziehbares und möglichst lückenloses Sicherheitsnachweiskonzept und somit die methodischen Grundlagen für einen Safety Case zu schaffen. Es ist weder Ziel des Vorhabens, Endlager auszulegen und hierzu den Sicherheitsnachweis im Hinblick auf eine Genehmigungsreife oder eine Standorteignungsaussage zu führen noch einen Safety Case zu erarbeiten. Es ist ebenso nicht vorgesehen, Einzelnachweise zu führen. Das Vorhaben wird arbeitsteilig mit der BGR Hannover und der GRS Braunschweig abgewickelt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Überarbeitung des FEP-Katalogs - DBE Technology GmbH

AP2: Szenarienentwicklung - BGR

AP3: Definition und Bewertung des Isolationszustandes "Sicherer Einschluss" - GRS

AP4: Behandlung von Unsicherheiten - GRS

AP5: Vorgehensweise bei einem Safety-Case-Konzept für ein HAW-Endlager im Salinar - GRS

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wird zu den AP's berichtet, für die DBE TECHNOLOGY GmbH verantwortlich ist.

Phase I des FuE-Vorhabens ISIBEL:

Die zur Phase I gehörigen Arbeitspakete wurden abgeschlossen. Die entsprechenden Berichte wurden fertig gestellt und vom Projektträger freigegeben.

AP1: Überarbeitung des FEP-Katalog.

AP1.1: Erstellung und Pflege einer Datenbank.

Die Datenbank wurde gemäß den von BGR, GRS und DBE Technology GmbH abgestimmten Anforderungen programmiert und allen Teilnehmern als Testversion zur Verfügung gestellt. Die Datensätze des FEP-Kataloges wurden komplett in die Datenbank übernommen. Die übernommenen Datensätze wurden anschließend von den Projektbeteiligten auf Korrektheit und Vollständigkeit überprüft. Weiterhin wurden die Datensätze redaktionell überarbeitet. Erfahrungen aus der Anwendung der Datenbank wurden diskutiert und haben in Einzelpunkten zu Ergänzungen und Optimierungen der Datenbank geführt.

AP1.2: Review und Revision des FEP-Katalog.

Es haben am 28.04.2009 und am 10.06.2009 zwei Treffen zwischen der externen Expertengruppe unter Leitung von Prof. Röhlig und dem ISIBEL-Team stattgefunden. Auf diesen Treffen hat das Review-Team das Ergebnis seiner Prüfung des FEP-Kataloges dargestellt und mit dem ISIBEL-Team diskutiert. Die Stellungnahme des Review-Teams gliedert sich in allgemeine Anmerkungen zu Verständnis und Methodik des FEP-Kataloges sowie FEP-spezifische Fragen und Kommentare. Alle Anmerkungen, Fragen und Kommentare wurden einerseits mit dem Review-Team und andererseits innerhalb des ISIBEL-Teams diskutiert. Als Ergebnis dieser Diskussionen wurde in einer Stellungnahme des ISIBEL-Teams dargestellt, wie die einzelnen Anmerkungen bei der Revision berücksichtigt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abstimmung und Diskussion des Abschlussberichtes für das Review der FEP-Datenbank mit dem Review-Team. Fertigstellung und weitere Erprobung der Datenbank. Überarbeitung des FEP-Kataloges in der Datenbank entsprechend den Anmerkungen des Review-Teams.

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 31.03.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 698.417,00 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:

Tests im System NaCl-H₂O mit den neu angefertigten isopiastischen Töpfen für höhere Temperaturen zeigten, dass die Fehler im gleichen Bereich liegen, wie bei den Versuchen mit dem Prototyp und somit verwendet werden können.

Weitere kleine Werkzeuge zur Stanzung der Dichtmatte für den isopiastischen Topf wurden im Hause angefertigt.

Test-Messungen im System MgSO₄-H₂O bei 90 °C ergaben, dass eine bis zu 18-tägige Versuchsdauer nicht ausreichend ist für Messungen in Systemen mit Fe(II)SO₄.

Die ersten isopiastischen Versuche wurden geplant und Fe(II)-Stammlösungen für deren Durchführung im Labor hergestellt.

Aufgrund des für Fe(II)-Verbindungen zu hohen Sauerstoffgehaltes in der übergangsweise angeschafften Glove-Box musste die Herstellung der Fe(II)-Stammlösungen – und damit die Durchführung der isopiastischen Versuche - bis zur Lieferung der neuen Glove-Box eingestellt werden.

Literaturstudie:

Keine neuen Arbeiten durchgeführt.

Löslichkeitsversuche:

Im Berichtszeitraum wurden die Untersuchungen zur Löslichkeit des Monohydrats im System Fe(II)-SO₄-H₂O fortgesetzt. Bei 66 °C konnte die Beprobung nun abgeschlossen werden, bei 70 °C und 80 °C konnte bereits eine Gleichgewichtseinstellung gefunden werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Dampfdruckmessungen:

Zur Bestimmung der erforderlichen Äquilibrationszeit im System FeSO₄-H₂O werden weitere Versuche im System MgSO₄-H₂O durchgeführt.

Sobald die neue Glove-Box geliefert und angeschlossen ist, wird mit den Messungen im System Fe(II)-Cl-H₂O und Fe(II)-SO₄-H₂O begonnen.

Literaturstudie:

Weitere Auswertung der Literaturrecherche bezüglich Fe(II)-OH-H₂O und für Fe(II)-Cl-H₂O im System der ozeanischen Salze.

Löslichkeitsversuche:

Weiterführung der Untersuchung des Systems Fe(II)-SO₄-H₂O im Monohydratfeld (70 - 80 °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 31.12.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.589.904,00 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 Wärme entwickelnden Abfällen. Die Wärme belastet die geotechnische Barriere, das Nahfeld bzw. den unterirdischen Einlagerungsbereich und das Fernfeld in der Umgebung des gesamten Endlagers. Es ist Ziel dieses Vorhabens, die Temperaturbelastung auf die drei genannten Bereiche im Zusammenhang mit dem Isolationspotenzial der Wirtsformation sowie mit der ingenieurtechnischen Realisierbarkeit der untertägigen Bohrlochlagerung zu charakterisieren. Aktuelle Untersuchungen in einem anderen Vorhaben (GENESIS) zeigen, dass Endlagerkonzepte für Tonstein-Formationen in Deutschland erreicht werden können, wenn man die Wärmeleitfähigkeit des Buffermaterials durch Zusatzstoffe erhöht. Dadurch wird die eingebrachte Wärme besser in die Tonformation abgeführt. Um diese Konzepte hinsichtlich ihrer Realisierbarkeit zu prüfen, sind entsprechende Materialuntersuchungen vorgesehen. Die eingebrachte Wärme bedingt auch permanente temperaturinduzierte Spannungsveränderung, deren Einfluss auf die Stabilität von Einlagerungsbohrlöchern analysiert werden soll. Bei organischen Bestandteilen führt eine Temperaturerhöhung zu einer Reifung im Hinblick auf eine Kohlenwasserstoffgenese. Die Reifung organischer Bestandteile hängt wesentlich davon ab, welchen Temperaturen die Substanz im Laufe ihrer Geschichte ausgesetzt war und wie lange die Temperaturen gewirkt haben. Die durch die eingebrachte Wärme künstlich hervorgerufene Reifung vorhandener organischer Substanz soll anhand von Modellberechnungen quantifiziert werden. Eine Temperaturerhöhung in einer Tonformation würde auch Umwandlungsreaktionen beschleunigen und damit den chemisch/mineralogischen Stoffbestand des Gesteins verändern. 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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Modelliert wurde die Rissentwicklung in der Auflockerungszone eines Einlagerungsbohrloches. Zu diesem Zweck wurde das Computerprogramm PFC (Particle Flow Code) der Firma Itasca verwendet. Die Rissentwicklung wurde sowohl als direkte Reaktion auf die Auffahrung analysiert als auch über einen 100-jährigen Beobachtungszeitraum, um die langfristige Rissentwicklung zu simulieren, die sich als Folge der Wärmeentwicklung in den umgebenden Bohrlöchern ggf. ergibt. Als Beispiel wurde ein generisches Endlager in Süddeutschland (Opalinuston) verwendet, das in einem vorangegangenen Vorhaben (GENESIS) hinsichtlich seiner geometrischen Verhältnisse thermisch ausgelegt wurde.

Erste Berechnungsergebnisse zeigen, dass die allgemeine Annahme, dass die Risse, die sich aufgrund der Auffahrung und der damit verbundenen schnellen Entlastung einstellen, sich im Laufe der Jahre durch thermische Expansion der sich erwärmenden Gesteinsumgebung wieder vollständig schließen, nicht zwingend der Fall ist.

AP5: Im Rahmen dieses AP beteiligt sich DBE TECHNOLOGY an dem von der NAGRA durchgeführten Versuch, dem sogenannten MB Test (Mine-By Test) im URL Mt. Terri. Ziel ist es, die hydromechanische Reaktion des Opalinustons auf eine Streckenauffahrung zu erfassen. Diese wurde dazu messtechnisch begleitet, wobei der zu durchörternde Gebirgsbereich im Vorfeld instrumentiert wurde. Die Beteiligung an diesem Experiment beinhaltet eine detaillierte Prognoseberechnung bezüglich des Gesteinsverhaltens, die anschließende Interpretation der Versuchsergebnisse unter Durchführung einer Parameteridentifizierung mittels versuchsbegleitender numerischer Modellierung. Die Prognosemodellierung fand im Rahmen eines kleinen Wettbewerbs mit verschiedenen Modellierungsgruppen statt. Messergebnisse wurden seitens Nagra erst freigegeben, nachdem alle Teams eine Berechnung vorgelegt hatten. Auf diese Weise konnte geprüft werden, wie verlässlich Prognoseberechnungen sind, insbesondere wenn sowohl Modellierer als auch das verwendete Computerprogramm verschieden sind.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Weitere Berechnungen zur zeitlichen Entwicklung der EDZ und ihres Riss-Systems.

AP5: Fortführung der analysierenden Modellierung des Mine-By Tests in Mont Terri zur Verbesserung der Parameter-Identifikation und damit zur Beschreibung des geomechanischen Verhaltens der Tonsteinformation.

AP6: Modellentwicklung und Test sowie Durchführung einer Prognoseberechnung für den neuen TED-Erhitzerversuch in Bure in Abstimmung mit Andra.

Durchführung von Labormessungen an Kernmaterial aus den Bohrungen des TED-Versuches zur Bestimmung der thermo-physikalischen Gesteinsparameter im gesamten Bereich des Versuchsortes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M. & Buntebarth, G. (2009): Influence of graphite and quartz addition on the thermo-physical properties of bentonite for sealing heat-generating radioactive waste, Applied Clay Science Vol. 44, pp. 206-210.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10116
Vorhabensbezeichnung: Barriereintegrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs in Tonformationen (BET)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 709.575,00 EUR	Projektleiter: Dr. Miehe	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Vorhaben BET soll der grundsätzliche Mechanismus der Gasausbreitung im einschlusswirksamen Gebirgsbereich eines ungestörten konsolidierten Tonsteins geklärt und die infolge höherer Gasdrücke zu erwartenden signifikanten Änderungen der hydraulischen Eigenschaften (Gaseintrittsdruck, effektive Permeabilität) quantifiziert werden. Im Hinblick auf die Ableitung relevanter Prozessmodelle soll der Frage nachgegangen werden, ob der Gaseintritt ins Gebirge vorrangig dilatanzgesteuert, d. h. durch Aufweitung des vorhandenen Porensystems mit einhergehender Erhöhung der Permeabilität oder durch die Bildung neuer diskreter Risse infolge des Überschreitens der minimalen Hauptspannung (Frac) stattfindet. Für die Belange der Langzeitsicherheit des Endlagers soll darüber hinaus geklärt werden, ob und mit welchem zeitlichen Verlauf es zu einer Rückbildung bzw. Verheilung der gebildeten Fließwege kommt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: In-situ-Untersuchungen: In Bohrungen wird eine gasdruckinduzierte Schädigung des Gebirges mit Bestimmung der Gasinfiltrationsrate nach Gaseintritt durch Gasdruckaufbau erzeugt. Anschließend erfolgen Untersuchungen zum Verheilungsverhalten des geschädigten Gebirges durch zeitlich gestaffelte Wiederholung der Gas-Fracdruckmessungen.
- AP2: Laboruntersuchungen: Erzeugung einer gasdruckinduzierten Schädigung bei unterschiedlichen mechanischen Belastungen und Gasinjektionsraten sowie Untersuchungen, wie sich Wegsamkeiten bilden und verhalten (dilatanzbedingte Aufweitung von Fließwegen und vorhandener Risse oder Bildung neuer Risse). Untersuchung des Verheilungsverhaltens der geschädigten Proben unter den in Mt. Terri herrschenden In-situ-Bedingungen bezüglich der Gebirgsspannung, der Zeit sowie des Einflusses von Tonwasser und Überprüfung der Übertragbarkeit der an kleinen Proben ermittelten Laborergebnisse auf Proben größeren Maßstabs.
- AP3: Abschließende Bewertung der In-situ- und Laborergebnisse und Bereitstellung eines Schädigungsmodells.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Zur Überprüfung des Verheilungsverhaltens in den In-situ-Bohrungen wurden die mit Formationswasser gefüllten Bohrungen über einen längeren Zeitraum sich selbst überlassen. Um den Vorgang nicht zu stören, erfolgen weitere Injektionstests erst im Sommer 2009. Dies ist möglich, weil das Projekt kostenneutral um neun Monate bis zum 31. März 2010 verlängert wurde.

AP2:

Zur Überprüfung der bisherigen Untersuchungen an Bohrkernen unter hydrostatischen Bedingungen in Hinsicht auf mögliche apparative Einflüsse auf das Fließverhalten, erfolgten Messungen an Kernen unter triaxialen Einspannbedingungen. Die Mantelspannung betrug ca. 3.5 MPa und die Axialspannung zw. 4 und 5 MPa. Das Aufbringen der Axialspannung führte zu einer Verringerung der Gaspermeabilität von ca. 10^{-18} m^2 auf ca. 10^{-19} m^2 . Die Versuche haben das grundsätzliche Verhalten, dass sich bereits bei Injektionsdrücken unterhalb der Mantelspannung eine Vergrößerung der Gaspermeabilität einstellt, bestätigt. Ab einem Injektionsdruck von ca. 2 MPa war eine Zunahme der Gaspermeabilität bis auf 10^{-16} m^2 feststellbar. Eine Verringerung und darauf folgende Erhöhung des Injektionsdrucks führte erst zu einer Abnahme und anschließend zu einer Zunahme der Permeabilität. Die Untersuchungen wurden bei erhöhter Temperatur bis 90 °C fortgesetzt. Bei Temperaturen zw. 50 bis 90 °C war ein Wasseraustrag aus der Probe feststellbar. Über die Zeit war ein Anstieg der Gaspermeabilität zu beobachten, was auf die Verdrängung des Wassers und somit auf eine Vergrößerung der freien Fließwege für das Gas zurückzuführen ist. Mit Herabsetzen der Temperatur kommt auch der Wasseraustritt zum Stillstand. Im Januar 2009 konnten 3 Großbohrkerne für die Untersuchungen in größerem Maßstab erbohrt werden. Mit den Messungen wurde begonnen.

AP3:

Die aus den Labor- und In-situ-Versuchen vorliegenden Daten legen nahe, dass es beim Gas Eintritt in der Regel nicht zur Ausbildung diskreter Risse kommt, sondern dass die dilatante Gebirgsaufweitung die hydromechanische Kopplung besser beschreibt. Zur Beschreibung dieses Verhaltens ist möglicherweise das im von der GRS verwendeten Programm CODE_BRIGHT implementierte neue Modell für Tonstein geeignet; das wird zurzeit geprüft.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Wiederholung der Wasserinjektionstests.

Nach Erreichung des Ausgangszustandes Wiederholung des Gasinjektionstests.

AP2: Fortsetzung der Untersuchungen bei erhöhter Temperatur.

Weiterführung der Versuche an Großbohrkernen.

AP3: Prüfung bzw. Erstellung des Schädigungs-/Verheilungsmodells.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10126
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZ Karlsruhe		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 298.298,00 EUR	Projektleiter: Dr. Marquardt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es wird eine einheitliche, umfassende und konsistente thermodynamische Referenzdatenbasis für ausgewählte Radionuklide für eine Temperatur von 25 °C 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 Forschungszentrum Dresden-Rossendorf (FZD), der TU Bergakademie Freiberg und der Colenco Power Engineering.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektmanagement: Koordination zur Datenerhebung der Radionuklid-Datenbasis im Verbundvorhaben. Erstellung von Berichten und Vorbereitung von Workshops, Vorstellung von Ergebnissen auf Konferenzen.
- AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation: Erstellung von Qualitätsrichtlinien, Archivierung von Quellenangaben und Rechnungen zur Validierung von Daten. Ziel der Validierung von Daten ist es zu prüfen, inwieweit verifizierte Rechencodes wie EQ3/6 mit Hilfe der erstellten Parameterdateien in der Lage sind, die Gleichgewichte in komplexen Lösungssystemen vorauszusagen.
- AP3: Datenbasis für Radionuklide: Erfassung und Bearbeitung der thermodynamischen Daten für die Radionuklide Tc, Th, Np, Pu, Am und Cm für die Temperatur von 25 °C. Es werden Festphasen als auch in wässriger Phase gelöste Spezies erfasst. Einzugebende Daten sind Bildungs- und Reaktionsdaten relevanter Spezies (z. B. $\log K^\circ$, $\Delta_f G_m^0$, $\Delta_r G_m^0$), die dazugehörigen Reaktionen, Wechselwirkungsparameter für das Pitzer- bzw. SIT-Modell, Qualitätsstufen, Quellenangaben und Kommentare.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

1.) Dokumentation (THEREDA-Handbuch)

Für das THEREDA-Handbuch Teil 3 ("Richtlinien zur Datenauswahl") wurden zahlreiche Unterkapitel fertig gestellt bzw. um Richtlinien für bisher nicht bedachte Probleme erweitert. Das THEREDA-Handbuch Teil 4 ("Qualitätssicherung") wurde komplett fertig gestellt. Dieses Kapitel enthält eine ausführliche, anhand von Beispielen unterlegte Anleitung für die Editoren von THEREDA zur Vergabe der Qualitätsmerkmale für die Datenklasse (data class DC), Datenqualität (data quality DQ) und Datenquelle (data source DC).

2.) Dokumentation der Datenauswahl

Zur Nachvollziehbarkeit der in THEREDA eingegebenen Daten, insbesondere für Daten, die im Rahmen von THEREDA neu evaluiert wurden und noch nicht im Rahmen von öffentlichen Publikationen zugänglich sind, werden diese Daten in lesbaren Berichten zusammengefasst. Diese sollen Bestandteil des Abschlussberichtes werden. Für diesen Zweck wurden Datenblätter (Tabellen) erstellt, die es ermöglichen, die Reaktionsdaten für jeweils eine Festphase oder aquatische Spezies sowie die Wechselwirkungskoeffizienten (SIT-Koeffizienten und Pitzer-Koeffizienten) mit den Komponenten des ozeanischen Salzsystems systematisch aufzulisten. Diese Tabellen enthalten auch die Informationen bzgl. der Literatur, Qualitätsmerkmale und sonstige Anmerkungen (z. B. zugrunde liegendes Analogon).

3.) Datenauswahl

a) SIT-Koeffizienten für Spezies im System der ozeanischen Salze

Da in THEREDA neben der Datenbasis zur Modellierung mit dem Wechselwirkungsmodell von Pitzer auch eine Datenbasis für Modellrechnungen mit der in der NEA-TDB benutzten einfachen SIT (Specific Ion Interaction Theory) enthalten soll, wurden sämtliche SIT-Koeffizienten für die Komponenten des erweiterten ozeanischen Salzsystems (H-Na-K-Mg-Ca-OH-HSO₄-SO₄-HCO₃-CO₃-CO₂(g)-H₂O bei 25 °C) zusammengestellt und eingegeben. Teilweise wurden die SIT-Koeffizienten anhand geeigneter Analoga abgeschätzt.

b) SIT-Modell für Silicatspezies

Die in der NEA-TDB enthaltenen Reaktionsdaten für Silicatspezies und die damit konsistenten SIT-Koeffizienten wurden ebenfalls in THEREDA eingegeben.

c) Daten für Modellrechnungen in Perchloratlösungen

Sehr viele Daten für Actinid- und Übergangsmetallionen stammen traditionell aus Experimenten in Perchloratlösungen. Daher ist es wünschenswert, dass auch diese Lösungen mit THEREDA modelliert werden können. Daher wurden die thermodynamischen Basisdaten für ClO₄⁻ (sekundäres Basisspezies; hypothetische Bildungsreaktion: Cl⁻ + 4H₂O(l) <=> ClO₄⁻ + 4H₂(g)) sowie die SIT- und Pitzer-Koeffizienten (soweit bekannt) für die Wechselwirkungen mit den ionischen Komponenten des ozeanischen Salzsystems zusammengestellt. Ferner werden in THEREDA die bekannten SIT- und Pitzer-Koeffizienten für die Wechselwirkung kationischer Actinidspezies mit ClO₄⁻ eingegeben.

Alle diese Daten wurden auch mit den Qualitätsmerkmalen hinsichtlich Datenklasse (data class DC), Datenqualität (data quality DQ) und Datenquelle (data source DC) versehen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Für das letzte Halbjahr der Projektphase I werden die bisher vorliegenden thermodynamischen Daten für Neptunium, Plutonium, Americium, Curium und Technetium aufgearbeitet und unter Berücksichtigung der THEREDA-Kriterien in die Datenbasis eingebaut. Das THEREDA-Handbuch wird fertig gestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10136
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 91.185,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brendler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt THEREDA (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln und Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe) entwickelt eine umfassende thermodynamische Datenbasis zur geochemischen Modellierung der Schadstofffreisetzung aus Endlagerprojekten. 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 Datenbasen vorhandenen Datenbestand zu integrieren. Die Datenbank hilft bei der Identifikation von Wissenslücken und beim Entwurf von Strategien zu deren Schließung.

Im weiteren Verlauf des Vorhabens werden Werkzeuge zur Verfügung gestellt, um automatisiert anwendungsspezifische Parameterdateien aus der Datenbank zu generieren. Die Parameterdateien werden über das Internet der interessierten Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt. Damit wird auch eine nützliche Informations-Rückkopplung an die Bereitsteller der Datenbank ermöglicht.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektmanagement
(Berichtswesen, Treffen mit Projektpartnern, Intranet)
- AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation
(Testrechnungen mit vom DB-Generator entwickelten Parameterdateien, Konsistenzprüfungen, Anwenderhandbuch)
- AP3: Datenbasis für die Radionuklide
(FZD: Uran und Radium)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Projektmanagement

- Aktivitäten wurden dem BMBF-Teilprojekt zugeordnet, siehe dort

AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation

- Weiterarbeit an Kapitel 3 (Richtlinien zur Datenauswahl) und 5 (Technische Grundlagen der Datenbank) des Handbuchs, Update von Kapitel 1

AP3: Datenbasis für die Radionuklide

- Weitere Dateneingabe zum Uran (Mineralphasen und Wechselwirkungsparameter)
- Dateneingabe zum Radium

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Pflege und Erweiterung der Intranetseite

AP2:

- Fertigstellung von Kapitel 3 (Richtlinien zur Datenauswahl) und 5 (Technische Grundlagen der Datenbank)
- Erstellung des Kapitels 6 (Dateneingabe)

AP3:

- Datenbewertung der Daten zum Uran und zum Radium

5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Altmaier, V. Brendler, S. Gester, S. Hagemann, H.-J. Herbert, C. Marquardt, H. C. Moog, V. Neck, A. Richter, T. Scharge, W. Voigt, S. Wilhelm, T. Willms, G. Wollmann: „THEREDA - A thermodynamic reference database for nuclear waste disposal in Germany”. SIAM Conference on Mathematical & Computational Issues in the Geosciences (GS09), 15-18.06.2009, Leipzig, Germany.

V. Brendler, S. Gester, A. Richter, M. Altmaier, C. Marquardt, V. Neck, H. Moog, S. Hagemann, H.-J. Herbert, T. Willms, W. Voigt, G. Wollmann, S. Wilhelm: „THEREDA - The Thermodynamic Reference Database for Nuclear Waste Disposal in Germany”. Waste Management 2009, Phoenix (AZ), USA, 01.-05.03.2009.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10146
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 77.452,00 EUR	Projektleiter: Dr. Moog	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel dieses Teilvorhabens ist es eine einheitliche, konsistente und qualitätsgesicherte thermodynamische Referenzdatenbasis für die Matrixelemente Aluminium und Silizium zu schaffen, die zusammen mit den Referenzdatenbasen der anderen Teilprojekten eine umfassende thermodynamische Gesamtdatenbasis bildet. Diese soll zur geochemischen Modellierung von Nah- und Fernfeldprozessen für die derzeit in Deutschland diskutierten Wirtsformationen für ein Endlager radioaktiven Abfalls verbindlich verwendet werden.

Die Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) wird innerhalb dieses Teilprojektes die thermodynamischen Daten die Matrixelemente Aluminium und Silizium aus der Literatur zusammenstellen. Diese werden nach einheitlich vorher festgesetzten Kriterien bewertet und in einer Datenbank zusammenfasst.

Einen besonderen Schwerpunkt wird auf die Parameter, die zur Modellierung in salinaren Milieu benötigt werden, gelegt. Es handelt sich dabei um Ion-Ion-Wechselwirkungsparameter (Pitzer-Parameter). Für diese Pitzer-Parameter existiert bisher noch keine allgemein zugängliche, umfassende, abgesicherte und konsistente Datenbasis.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Entwicklung, Ergänzung und Dokumentation konsistenter thermodynamischer Datenbasen für Aluminium bei 25 °C
- Entwicklung, Ergänzung und Dokumentation konsistenter thermodynamischer Datenbasen für Silizium bei 25 °C
- Projektkoordination

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Datenerfassung:

Si, Al: die Arbeiten zur Entwicklung eines konsistenten Satzes thermodynamischer Daten wurden abgeschlossen und dokumentiert. Für die THEREDA-Datenbasis wurde beschlossen, stattdessen mit dem von Reardon (1990) veröffentlichten Daten weiterzuarbeiten. Diese wurden in die Datenbank eingegeben.

Reardon, E. J. (1990): An ion interaction model for the determination of chemical equilibria in cement/water systems, *Cem. Concr. Res.* (20), 175-192.

4. Geplante Weiterarbeiten

Verfassen des Abschlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum 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 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 517.504,00 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

1. Synthese stickstoff- und schwefelhaltiger Huminsäure-Modellverbindungen und spektroskopische Charakterisierung der Heteroatom-Funktionalitäten
2. Untersuchung des Einflusses stickstoff- und schwefelhaltiger Funktionalitäten auf die U(VI)- und Am(III)-Komplexierung mit Huminsäuren und organischen Modellliganden
3. Bestimmung der Konzentrations- und Temperaturabhängigkeit der Komplexbildungskonstante für die U(VI)-Huminsäure-Komplexierung
4. Untersuchung der Bildung ternärer U(VI)-Carbonato-Humat-Komplexe
5. Untersuchung der U(IV)-Komplexierung durch Humin- und Fulvinsäuren
6. Identifizierung der für die Komplexierung von Actiniden in verschiedenen Oxidationszuständen relevanten funktionellen Gruppen der Huminstoffe
7. Quantifizierung und Charakterisierung der von Tonen freigesetzten anorganischen und organischen Kolloide
8. Untersuchungen zur U(VI)-Sorption an Opalinus-Ton und zum Einfluss von Huminstoffen auf die U(VI)-Sorption
9. Diffusionsexperimente zum U(VI)-Transport in Opalinus-Ton

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- XPS-Messungen zur Identifizierung von Schwefelfunktionalitäten in synthetischen Huminsäure (HS)-Modellverbindungen wurden in Zusammenarbeit mit dem Institut für Kernchemie, Universität Mainz fortgesetzt. Es wurde die Schwefelspeziation der HS M1-S-1 (S = 1.94 %) und M1-S-2 (S = 3.94 %) bestimmt und mit Aldrich HS (S = 3.8 %) verglichen. In allen untersuchten HS liegt Schwefel in mindestens zwei unterschiedlichen Spezies vor, die reduzierten (z. B. Thiole, Dialkylsulfide und/oder Disulfide) und oxidierten Schwefelfunktionalitäten (z. B. Sulfoxide) zugeordnet werden können. Reduzierte Schwefelfunktionalitäten dominieren.
- Mittels TRLFS und fs-TRLFS wurde die U(VI)-Komplexierung der schwefelhaltigen HS-Modellverbindungen untersucht ([HA] = 10 mg/l; pH = 3.80; I = 0.1 M NaClO₄; pCO₂ = 10^{-3.5} atm). Die TRLFS-Daten (Auswertung mit dem Ladungsneutralisationsmodell; Kim und Czerwinski, 1996) zeigen, dass die HS vergleichbare Komplexbildungskonstanten haben. Mit Anstieg des Schwefelgehalts der HS von 1.94 auf 3.94 % wurde eine Erhöhung der HS-Beladungskapazität von 26 auf 36 % bestimmt. Eine mögliche Ursache dafür, kann die Beteiligung schwefelhaltiger funktioneller Gruppen an der U(VI)-Komplexierung sein. Mittels fs-TRLFS (Auswertung mittels nichtlinearer Fluoreszenzlöschung; Ryan und Weber, 1982) wurden erste Komplexierungsdaten erhalten, die mit den TRLFS-Ergebnissen vergleichbar sind.
- Die bei der U(VI)-Sorption an Opalinuston in Abwesenheit und Gegenwart von Huminsäure gebildeten Oberflächenkomplexe wurden mittels EXAFS untersucht.
- Diffusion von HTO durch Opalinuston unter anaeroben Bedingungen an zwei Zellen ($D_{e1} = (7.23 \pm 1.36) \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$, $\alpha_1 = 0.55 \pm 0.10$; $D_{e2} = (5.31 \pm 1.01) \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$, $\alpha_2 = 0.44 \pm 0.08$).
- Start der U(VI)-Diffusion in Opalinuston in Abwesenheit und Gegenwart von Huminsäure.
- Sorption von U(VI) ($1 \cdot 10^{-6} \text{ M}$) an Opalinuston in Abwesenheit und Gegenwart von Huminsäure (10 mg/l, 50 mg/l) in 0.1 M NaClO₄ unter aeroben Bedingungen in Abhängigkeit vom pH-Wert.
- Untersuchungen zur Am(III)-Komplexierung mit stickstoff- und schwefelhaltigen Liganden. Mittels TRLFS ließ sich keine Komplexierung des Am(III) mit Anthranilsäure feststellen.
- Die U(VI)-Komplexierung durch Phenylphosphonsäure wurde mittels TRLFS untersucht (I = 0.1 M; pH 3). Es wurden folgende Komplexbildungskonstanten bestimmt: $\log \beta_{11} = 3.44 \pm 0.44$ und $\log \beta_{12} = 6.75 \pm 0.52$.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der fs-TRLFS-Untersuchungen zur U(VI)-Huminsäure-Komplexierung mit schwefelhaltigen HS-Modellverbindungen.
- Sorption von U(VI) an Opalinuston in Abwesenheit und Gegenwart von Huminsäure in Opalinustonporenwasser bzw. in 0.1 M NaClO₄ unter anaeroben Bedingungen.
- Fortführung der Untersuchungen zur Am(III)-Komplexierung mit stickstoff- und schwefelhaltigen Modellliganden.
- Laserspektroskopische Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der U(VI)-Huminsäure-Komplexierung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Schmeide, K., Bernhard, G.: Redox stability of neptunium(V) and neptunium(IV) in the presence of humic substances of varying functionality. *Radiochim. Acta* 2009, accepted.

Raditzky, B., Schmeide, K., Sachs, S., Geipel, G., Bernhard, G.: Interaction of uranium(VI) with nitrogen containing model ligands studied by laser-induced fluorescence spectroscopy. *Polyhedron* 2009, submitted.

Zuwendungsempfänger: Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55099 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 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 631.950,00 EUR	Projektleiter: Prof. Reich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Sorption von Np und Pu an natürlichem Tongestein wird 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 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 Forschungszentrums Dresden-Rossendorf, dem Institut für Nukleare Entsorgung des Forschungszentrums Karlsruhe und der Universität des Saarlandes zusammengearbeitet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Batchexperimente mit Np/Pu-Tongestein und Einfluss von Huminstoffen;
- Speziationsuntersuchungen in den Systemen Np/Pu-Tongestein mit XANES und EXAFS und in dem System Tongestein-Huminstoff mit XPS;
- Diffusionsexperimente mit Np(V) in natürlichem Tongestein und Einfluss von Huminstoffen;
- analytisch apparative Entwicklung, u. a. Kopplung CE-ICP-MS, CE-DAD und CE-RIMS.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Einfluss der Temperatur auf das Sorptionsverhalten von 8×10^{-6} M Np(V) an Opalinuston (OPA) in synthetischem Porenwasser (pH 7,6) wurde bei 60 ± 2 °C in Abhängigkeit der Tonmenge (2-20 g/l) an Luft untersucht. Bei 60 °C ist die Sorption von Np(V) an OPA um bis zu 20 % höher als bei Raumtemperatur (RT), wobei diese relative Zunahme bei 20 g/l Ton am größten war. Auch in mit Calcit gesättigter Lösung wurde bei 60 °C in dem pH-Bereich 6,5-8,5 eine bis zu 20 % höhere Sorption von Np(V) an OPA gegenüber RT beobachtet. Bei $\text{pH} \geq 9$ hatte die Temperaturerhöhung jedoch keinen Einfluss auf die Sorption von Np(V).

Zwei OPA-Bohrkerne wurden an Luft bzw. unter Argonatmosphäre mit synthetischem Porenwasser vorkonditioniert und anschließend mittels Diffusion mit HTO charakterisiert. Die erhaltenen Diffusionsparameter D_e und α für HTO stimmen gut mit den früheren Ergebnissen überein. Danach erfolgte die Diffusion von 8×10^{-6} M $^{237}\text{Np(V)}$ unter anaeroben Bedingungen (Ar-Box) bzw. in Gegenwart von Huminsäure (10 mg/l) an Luft. Bevor die beiden Diffusionsexperimente nach 43 Tagen beendet und die Diffusionszellen geöffnet wurden, wurde über einen Zeitraum von 18 h parallel zum $^{237}\text{Np(V)}$ die Diffusion von $^{22}\text{Na}^+$ untersucht. Zur Bestimmung des Konzentrationsprofils von ^{237}Np und ^{22}Na in OPA, wurden 40 dünne Schichten mit einer Dicke von jeweils ca. 40 μm von den Bohrkernen abgeschliffen. Die γ -spektroskopischen Messungen zur Bestimmung der Aktivitäten von ^{237}Np und ^{22}Na in den Schleifproben und die Berechnung der Diffusionsparameter werden erst im Laufe des zweiten Halbjahres 2009 abgeschlossen sein.

Im April 2009 erfolgten an der Rossendorf-Beamline in Grenoble die ersten EXAFS-Messungen zur Speziation von Np(V) bei der Sorption an OPA als Funktion des pH-Wertes in An- und Abwesenheit von Luft. Bei allen Sorptionsproben ergaben die XANES- und EXAFS-Messungen, dass der Oxidationszustand des sorbierten Neptunium +5 ist, d. h. die Reduktion von Np(V) zu Np(IV) unter anaeroben Bedingungen konnte nicht nachgewiesen werden. Allerdings sollen diese Messungen vor Ende 2009 mit einem verbesserten Probenhalter, der den Zutritt von Sauerstoff während des Probentransportes und der EXAFS-Messungen verhindern soll, wiederholt werden. Bei einigen Sorptionsproben konnte die Bildung von Np(V)-Carbonat-Oberflächenkomplexen mit EXAFS nachgewiesen werden.

Die K_d -Werte für die Sorption von 8×10^{-8} M Pu(III) bzw. 9×10^{-8} M Pu(IV) an OPA in synthetischem Porenwasser (pH 7,6) wurden in Batchexperimenten unter anaeroben Bedingungen und $p(\text{CO}_2) = 10^{-2,3}$ atm bestimmt. Dabei wurde die Tonmenge von 0,2-10 g/l variiert. Die mittleren K_d -Werte betragen 114 m^3/kg für Pu(III) und 178 m^3/kg für Pu(IV). Auf Grund eines Defektes beim Datenerfassungssystem der RIMS-Apparatur können die Pu-Filamente, die nach der kapillarelektrophoretischen Trennung (CE) der verschiedenen Pu-Spezies im Porenwasser hergestellt wurden, erst im zweiten Halbjahr 2009 mit RIMS gemessen werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Batchexperimente zur Sorption von Np(V) an OPA in Porenwasser unter anaeroben Bedingungen bei 60 °C.
- Diffusionsversuche zum Einfluss von Huminsäure auf die Diffusion von $^{237}\text{Np(V)}$ in OPA unter anaeroben Bedingungen.
- Abschluss der EXAFS-Messungen zur Speziation von Np(V) bei der Sorption an OPA als Funktion des pH-Wertes in An- und Abwesenheit von Luft. Der entsprechende Messzeitantrag wurde von der ESRF bewilligt.
- Abschluss der Bestimmungen der Pu-Speziation in den Lösungen nach der Sorption von Pu an OPA mit Hilfe der CE-RIMS.

5. Berichte, Veröffentlichungen

T. Wu, S. Amayri, T. Reich, Neptunium(V) sorption onto gibbsite, *Radiochimica Acta* 97(2), 99-103 (2009).

T. Reich, S. Amayri, J. Drebert, D. Fröhlich, L.R. Van Loon, T. Wu, Sorption and diffusion of Np(V) in Opalinus Clay, Poster auf der Goldschmidt 2009, 21.-26.06.2009, Davos, Schweiz, *Geochimica et Cosmochimica Acta* 73(13)S1, A1084 (2009).

Zuwendungsempfänger: Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, Permoserstraße 15, 04318 Leipzig		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 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 836.371,00 EUR	Projektleiter: Dr. Lippold	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zielsetzung des ersten Teilvorhabens besteht in der Bereitstellung von Bewertungsgrundlagen zum Einfluss organischer Kolloide auf die Migration von Actiniden in Tongestein. Dazu wird die Ko-adsorption 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 des zweiten Teilvorhabens ist 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

- AP1.1: Untersuchung und Modellierung der Wechselwirkungen in ternären und binären Systemen aus radiotoxischen Schwermetallen, Huminstoffen und Tonen bzw. Tonmineralien in Abhängigkeit von pH-Wert und Elektrolytgehalt
- AP1.2: Stabilität gelöster und oberflächengebundener Humatkomplexe; Einfluss höherwertiger Metalle auf das Adsorptionsverhalten von Huminstoffen
- AP1.3: Zeitabhängigkeit des Konkurrenzeffektes von Al(III) bezüglich der Humatkomplexbildung radiotoxischer Schwermetalle
- AP1.4: Reversibilität der Adsorption von Huminstoffen; Adsorptionsverhalten von Metallhumaten an huminstoffgesättigten Oberflächen
- AP2.1: Lokaler Lösungstransport in homogenisierten Tonproben in Abhängigkeit von Dichte, Sättigung und geochemischen Parametern
- AP2.2: Lokaler Lösungstransport in Bohrkernen mit realer Struktur
- AP2.3: Lokaler Kolloidtransport analog zu AP2.1 und 2.2

- AP2.4: Autoradiographische Untersuchung von Adsorbatverteilungen in Relation zum Oberflächenpotential
 AP2.5: Lokaler Kolloidtransport in Granitspalten
 AP2.6: Matrixdiffusion in Granit

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Da Transportmodelle auf Gleichgewichtsdaten basieren, muss die Dynamik der mobilitätsbestimmenden Prozesse hoch genug sein, um unter Strömungsbedingungen ständig ein lokales Gleichgewicht herzustellen. Wiederfindungen in Säulenversuchen lassen darauf schließen, dass diese Voraussetzung für Adsorption und Transport von Huminstoffen nicht erfüllt ist, wobei zwischen irreversiblen Vorgängen und Filtrationseffekten bisher nicht unterschieden werden konnte. Mittels ^{14}C -Markierung gelang es nun erstmals, die Reversibilität des Adsorptionsprozesses direkt in Traceraustausch-Experimenten zu analysieren. Hierzu wurden Adsorptionsisothermen für das System Huminsäure (Aldrich) / Kaolinit bis in den Sättigungsbereich aufgenommen, wobei der Radiotracer in vernachlässigbarer Menge zum einen im Anfangszustand, zum anderen im Gleichgewichtszustand des Systems eingeführt wurde. Zum Vergleich wurden analoge Untersuchungen im System Tb/ ^{160}Tb / Kaolinit durchgeführt. Die bisherigen Ergebnisse deuten darauf hin, dass erstens die Huminstoffadsorption im Vergleich zur Ionenadsorption zwar durch eine erheblich langsamere Austauschkinetik charakterisiert ist, und zweitens immerhin teilweise reversibel abläuft.

Die prozestomographischen Untersuchungen von Injektionsexperimenten wurden plangemäß fortgesetzt. Bei der Injektion von ^{124}I -markierter Huminsäure (Aldrich) in gering konsolidiertem Opalinuston konnte kein signifikanter Transport der Kolloide nachgewiesen werden. Während der Injektion von ^{124}I -markierter synthetischer Porenwasserlösung über die Stirnfläche einer weitgehend intakte Opalinuston-Bohrkernprobe zeigte sich ein deutlich inhomogenes Verhalten, das vermutlich z. T. auf Alteration des Kernes durch Druckentlastung und Trocknung während der Lagerung zurückzuführen ist. Nach Abschalten des Injektionsdruckes konnte eine weitere schnelle diffusive Tracerausbreitung während der Abklingzeit des Tracers beobachtet werden.

Artefakte durch Streuung und Absorption der Photonenstrahlung erwiesen sich als hinderlich bei der Auswertung der tomographischen Untersuchungen. Durch die geometrische Modellierung der Absorption konnte bereits eine deutliche Verbesserung erreicht werden; die Korrektur „regionaler Streueffekte“ soll nach Analyse der Streuaktivität durch Filterung der Rohdaten erfolgen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Traceraustausch-Studien mit ^{14}C -markierter Fulvinsäure, Variation der Austauschzeit zur Ermittlung kinetischer Konstanten
- Transportuntersuchungen an kompaktiertem Opalinuston mit kleineren Kolloiden (Fulvinsäure)
- radiale Diffusionsversuche an intaktem Opalinuston
- Verbesserung der Korrekturverfahren und quantitative Auswertung

5. Berichte, Veröffentlichungen

Lippold, H., Eidner, S., Lippmann-Pipke, J.: Kinetic effects in the complexation of radionuclides with humic substances in the presence of Fe(III) and Al(III). Vortrag, Goldschmidt 2009, Davos (Schweiz), 21.-26.06.09

Kulenkampff, J., Gajewski, C., Gründig, M., Lippmann-Pipke, J., Mittmann, H., Richter, M., Wolf, M.: Visualisation and Quantification of Transport in Barrier Rocks with Positron Emission Tomography. Geophysical Research Abstracts, Vol. 11, EGU2009-4382, 2009

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 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 538.240,00 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 Solvationsmodellen.

Bezug zu anderen Vorhaben:

Teilprojekt im Verbund „Actinidenmigration im natürlichen Tongestein“.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete:

AP1: Komplexierung durch Huminstoffe

Im AP1 werden computerchemische Untersuchungen zur Komplexierung von Aktinoiden durch Carboxyl- und alternative Funktionalitäten von Huminstoffen anhand von Modellen durchgeführt sowie Solvationsmodelle entwickelt und angewandt.

AP2: Sorption an Tonmineralien

Das AP2 umfasst quantenmechanische Berechnungen periodischer Modelle von Tonmineralien sowie computerchemische Untersuchungen zur Adsorption von Aktinoidenspezies auf Tonmineraloberflächen mit Hilfe dieser Modelle.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.3: Alternative funktionelle Gruppen

AP1.4: Reaktionsmechanismen

AP2.3, 2.5: Sorption an Kaolinit, Phyllosilikat

Die Rechnungen zur Komplexierung von Uranyl durch Sulfonsäuren (AP1.3) wurden fortgeführt, speziell für Lösungsmittelleffekte. Uranyl koordiniert mit Sulfonaten bevorzugt bidentat. Experimente des Projektpartners Rossendorf zeigen die Komplexierung für p-Hydroxybenzolsulfonsäure, nicht jedoch für Benzolsulfonsäure. In der Modellierung verhalten sich Benzol- und Hydroxybenzolsulfonat als Liganden jedoch sehr ähnlich. Gemäß Abschätzungen von Komplexierungskonstanten ist es unwahrscheinlich, dass für diese Säuren einfache Monosulfonatkomplexe zu beobachten sind. Um den Mechanismus der Komplexierung von Actinylen mit Acetat als prototypischen Carboxylatliganden zu untersuchen (AP1.4), wurde der Reaktionspfad für Neptunyl(V)-Monoacetat von einem außersphärischen Komplex über die mono- zur bidentaten Koordination verfolgt. Die bisherigen Ergebnisse deuten an, dass der Übergang zwischen mono- und bidentater Koordination einen tieferen Übergangszustand aufweist als die Reaktion von außersphärischer zu monodentater Koordination.

Arbeiten zur Sorption von Uranyl auf Al-Oktaederflächen von Kaolinit wurden um die Modellierung weiterer bidentater Oberflächenkomplexe ergänzt (AP2.3). Im Gegensatz zu bidentaten Komplexen mit Bindungen an benachbarte O-Atome der Oberfläche, die an das gleiche Al-Zentrum koordiniert sind (kurze Brücke), wurden auch Brückenplätze zwischen O-Atomen untersucht, die an benachbarten Al-Zentren verankert sind (lange Brücke). Im Falle zweifach deprotonierter langer Brücken wurden stabile Strukturen identifiziert, während Uranyl aus einfach deprotonierten langen Brücken in bisherigen Optimierungen zu kurzen Brückenplätzen wechselt. Dieser Befund deutet an, dass lange Brückenplätze nur bei erhöhtem pH zugänglich sind. Weitere Rechnungen zur Uranylsorption auf Kaolinit-Kantenflächen (AP2.5) zeigen teilweise eine spontane Hydrolyse der Adsorbatkomplexe. Da U-OH-Bindungen kurz, andererseits Bindungen des Uranyls an Sauerstoffe der Oberfläche (wegen Bindungskonkurrenz) relativ lang sind, ist es vermutlich im Allgemeinen nicht möglich, U-O-Bindungen entsprechend ihrer Länge als Liganden- bzw. Oberflächenbindungen zuverlässig zuzuordnen. Neu aufgenommen wurden Rechnungen zu Oberflächenstrukturen und der Adsorption an Kantenflächen von Phyrophyllit (AP2.3). Verschiedene Terminierungen von Kantenflächen sowie Varianten der Protonierung dieser Strukturen wurden zunächst ohne, dann auch mit Berücksichtigung der aquatischen Phase untersucht. Solvatisierung führt zu einer Verringerung der Energieunterschiede zwischen verschiedenen Protonierungsstrukturen und erhöht damit die Beweglichkeit der Oberflächenprotonen. Im Gegensatz zu Kaolinit wurden Adsorptionskomplexe mit drei Bindungen des Uranyls an die Oberfläche als neuartige Strukturen gefunden. Schließlich wird derzeit die Software NWChem im Hinblick auf die Modellierung solvatisierter Mineraloberflächen in Zusammenarbeit mit dem Entwickler evaluiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.4: Reaktionsmechanismen
 AP2.3, 2.5: Sorption an Kaolinit und Phyrophyllit

5. Berichte, Veröffentlichungen

R. S. Ray, S. Krüger, N. Rösch, Uranyl Monocarboxylates of aromatic Acids: A Density Functional Model Study of Uranyl Humate complexation, Dalton Transactions 18 (2009) 3590.
 A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch, Role of Aliphatic and Phenolic Hydroxyl groups in Uranyl Complexation by Humic Substances, Inorganica Chimica Acta 8 (2009) 2542.
 R. S. Ray A Relativistic Density Functional Study of Uranyl Hydrolysis and Complexation by Carboxylic Acids in Aqueous Solution Dissertation, TU München, 2009.
 Y. Zhang, A Density Functional Study of Uranyl Complexation by Sulfur Containing Humic Acids in Aqueous Solution Masterarbeit, TU München, 2009.

Zuwendungsempfänger: Universität des Saarlandes, Campus Saarbrücken, 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 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 502.243,00 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, Konkurrenzionen 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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden Versuche zur Extraktion natürlicher Organik aus Opalinuston durchgeführt. In der Literatur angegebenen Methoden zur Extraktion von Organika aus Tonen wurden für das verwendete System teilweise abgeändert übernommen. Neben diesen Batch-Extraktionen wurden auch Extraktionsver-

suche an Hand von Tonsäulen in der HPLC durchgeführt. Die erhaltenen Extrakte wurden hinsichtlich ihres Organikgehaltes untersucht. Neben TOC Messungen wurden auch UV-Vis Messungen durchgeführt, welche jedoch stark durch das verwendete synthetische Porenwasser beeinflusst wurden. Nach der Charakterisierung wurden die gewonnenen Extrakte für Batch-Versuche im ternären System Lanthanid/Opalinuston/Organik eingesetzt. Der Einfluss kleinerer Organikmoleküle, wie sie in den natürlichen Extrakten des Opalinustons vorkommen, auf die Mobilisierung der Lanthanide, wurde an Hand von Desorptionsversuchen untersucht. Dabei konnte festgestellt werden, dass die kleinen Organikmoleküle, ganz im Gegensatz zu den großen Huminsäuremolekülen, einen stark mobilisierenden Einfluss auf die Lanthanide ausüben. Während Huminsäure (HA) die Lanthanide zusätzlich ausfällen kann, werden die vorhandenen Lanthanide durch die Tonorganik weiter mobil in Lösung gehalten.

Um dieses Phänomen genauer zu untersuchen, wurden Komplexierungs- und Sorptionsuntersuchungen im binären (Lanthanid/Organik) und im ternären System (Lanthanid/Opalinuston/Organik) durchgeführt. Dabei wurden 900 ppb Lanthanid in synthetischem Porenwasser mit der 10-fachen Menge an Lactat bzw. Formiat oder einer Konzentration von 25 und 50 ppm HA versetzt. Vergleichend dazu wurden 900ppb Lanthanid in Porenwasser ohne Organik untersucht. Bei den Versuchen im ternären System wurde vorher noch Opalinuston zugegeben. Alle Proben wurden auf pH 7,6 eingestellt, 72 h konditioniert, zentrifugiert (12900 g) und mittels ICP-MS vermessen. Im binären System konnte festgestellt werden, dass Lactat zu einer 100 %igen Mobilisierung der Lanthanidionen führt, während HA über 50 % der Lanthanide ausfällt. Mit steigender HA-Konzentration nimmt diese Ausfällung noch zu. Im ternären System konnte ebenfalls eine erhöhte Mobilisierung durch Lactat festgestellt werden, während die Anwesenheit von HA im Vergleich zu den Ergebnissen ohne Organik keine Auswirkung zeigte.

Innerhalb des zweiten Projektschwerpunkts konnte die Optimierung der miniaturisierten Säulenversuche weiter fortgesetzt werden. Als zurzeit beste Parameter erwiesen sich eine Flussgeschwindigkeit von $1,0 \mu\text{l min}^{-1}$ (durch LC-Kapillarpumpe reproduzierbar regelbar) und eine Säulendimension von 20 mm x 4 mm (L x i.D.) als bester Kompromiss zwischen Durchbruchzeiten des Inertmarkers Iodid (155 min) bzw. Lactat (195 min) und dem Druckaufbau (bis ca. 85 bar maximal) innerhalb der Säule. Aufgrund der geringen Flussgeschwindigkeit ist das Injektionsvolumen im Normalfall auf ca. 1-2 μl beschränkt. Bei höheren Injektionsvolumina muss die Injektionsgeschwindigkeit von $100 \mu\text{l min}^{-1}$ auf $10 \mu\text{l min}^{-1}$ reduziert werden. Erste Versuche zum Einfluss von kleinen mobilen Tonorganika auf die Sorption bzw. Desorption von Europium an kompaktiertem Opalinuston (im Säulenversuch) konnten aktuell durchgeführt werden. Hierbei konnte ein deutlicher Einfluss der Organik (z. B. Lactat) auf die Sorption von Europium an Opalinuston festgestellt werden, was zurzeit genauer untersucht wird.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Speziation von Europium mit HA und natürlicher Organik (z. B. Lactat) mittels CE-ICP-MS.
- Einfluss von kleinen mobilen Tonorganika auf die Sorption bzw. Desorption von Europium an kompaktiertem Opalinuston (im Miniatur-Säulenversuch)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kautenburger, R. (2009): Influence of metal concentration and the presence of competing cations on lanthanide speciation with humic acid analysed by CE-ICP-MS. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry* 24, 934-938.

Kautenburger, R. (2009): Untersuchung des Einflusses geochemischer Parameter auf das Komplexierungsverhalten von Lanthaniden und Huminsäure mittels CE-ICP-MS. ANAKON 2009, Berlin (Vortrag).

Kautenburger, R. (2009): Speciation of Heavy Metal Pollutants and Humic Acids analyzed by CE-ICP-MS. European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry 2009, Graz (Vortrag).

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 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 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 813.235,00 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. Das natürliche tonorganische System wird aus reinen Komponenten nachgebaut um ihre Entstehung, ihre Eigenschaften sowie ihren Einfluss auf die Actinidenmigration nachvollziehen zu können. Zusammenarbeiten laufen mit dem Forschungszentrum Dresden, der Universität Mainz, Potsdam, Heidelberg, Universität des Saarlandes, IIF Leipzig sowie der TU München. Außerdem werden Zuarbeiten von der TU Graz, Inst. für Analytische Chemie und Radiochemie geleistet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Charakterisierung relevanter Tongesteinsproben.
- AP2: Diffusionsuntersuchungen von Actiniden und Analoga. Als stationäre Phase werden Tongestein aus Mt. Terri (Opalinuston) untersucht. Als mobile Phase dient ein synthetisches Porenwasser.
- AP3: Speziation der Actiniden in der mobilen Phase.
- AP4: Speziation der Actiniden im Ton: bestimmt wird die räumliche Verteilung der Actiniden in der Tonmatrix nach Diffusionsversuchen mit begleiteten Grundlagenuntersuchungen zur Actiniden-Tonorganika / Humat-Komplexierung.
- AP5: Synthese des natürlichen Systems aus reinen Komponenten.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Mittlerweile ist allgemein anerkannt, dass bei Redoxreaktionen von Huminstoffen (HS), hydrochinon-ähnliche Molekülstrukturen involviert sind. Offen bleibt allerdings die Frage, wie man den Redox-Zustand von HS zuverlässig bestimmen und beschreiben kann. Ein möglicher Weg könnte über spektroskopische Methoden erfolgen. Die photodynamischen Prozesse der HS beinhalten Energietransfers zwischen verschiedenen Strukturelementen und funktionellen Einheiten. Für diese Energieübertragungsprozesse sind die Eigenschaften der beteiligten Strukturelementen sowie ihre Anordnung und Kupplung der verschiedenen elektronischen Zustandssysteme von Bedeutung. Dazu gehört, dass redox-aktive Gruppen ihre Eigenschaften mit dem Redox-Zustand ändern. Aus diesem Grund wird unter Variation des Redox-Zustandes von Humin- und Fulvinsäuren, das Fluoreszenzverhalten von Humin-

und Fulvinsäuren untersucht. Der Redoxzustand von HS wird einmal elektrochemisch (Coulometrie, Potentiometrie), zum anderen chemisch unter Zugabe eines Reduktions- oder Oxidationsmittels, eingestellt. Als Kenngröße des Redox-Zustandes der gelösten HS wird parallel der Eh-Werten der Lösungen gemessen. In einem ersten Schritt wurden die Anregungs-Emissions-Matrizes (AEM) verschiedener Huminstoffe und Hydrochinone in Abhängigkeit des Eh-Wertes bei konstantem pH-Wert der wässrigen Lösung mit einem herkömmlichen Fluorometer gemessen. Anhand dieser AEM wurden Wellenlängen-Bereiche ausgewählt, um diese mit der laserinduzierten zeitaufgelösten Laserspektroskopie (TRLFS) auf Änderungen der Fluoreszenzeigenschaften in Abhängigkeit des Redox-Zustandes der HS zu untersuchen. Diese Untersuchungen laufen im Rahmen einer Kooperation mit dem Projektpartner der Uni Potsdam zusammen. Die Untersuchungen werden hauptsächlich in Karlsruhe durchgeführt, wohingegen Schlüsseluntersuchungen mittels TRLFS in Potsdam und C-XANES an der NLS / Brookhaven laufen. TRLFS wird in Potsdam durchgeführt, da hier die erforderliche hohe Zeitauflösung verfügbar ist. Erste gemeinsame Messungen weisen auf die Möglichkeit hin, dass die Reduktion der redox-sensitiven Gruppen zu einer Verringerung des Quenchens der Huminstoff-Fluoreszenz führt. Mit einem verfeinerten experimentellen Aufbau werden die gemeinsamen Untersuchungen fortgeführt.

Weitere Untersuchungen von Redoxreaktionen der HS und niedermolekularen „einfacheren“ Verbindungen mit redoxsensitiven Metallionen dienen zum Verständnis der Reaktions-Mechanismen. Hierzu wurde das Redoxverhalten von fünfwertigem Np untersucht in wohldefinierten anthrahydrochinonhaltigen Lösungen (2,6-Anthrahydrochinon-disulfonat (AH₂DS)) und in Lösungen von Huminstoff-Derivaten (HQHA), die mit Hydrochinon-Molekül-Einheiten angereichert waren. Mit HQHA fand eine schnelle Reduktion von Np(V) innerhalb von 1-2 Tagen statt. Die Menge an gebildeten Np(IV) hängt hierbei vom pH-Wert ab und beträgt 90 % (pH 4), 60 % (pH 6) und 40 % (pH 8). Erstaunlicherweise findet die Reduktion bei positiven Eh-Werten von ~250-300 mV statt. Dies ist im Gegensatz zu den Ergebnissen mit AH₂DS, wo die Reduktionskinetik zum einen langsamer ist (bis 15 Tage) und zum anderen eine merkliche Reduktion nur bei negativen Eh-Werten (-166 bis -211 mV) gefunden wurde. Eine Erklärung für diesen Unterschied im Redoxverhalten zwischen der niedermolekularen Anthrachinonverbindung und HQHA kann im Moment nicht gegeben werden, soll aber in weiteren Untersuchungen geklärt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Die Arbeiten zum Actiniden-Komplexierungsverhalten von extrahierten OPA-Kerogen und synthetischen Ton-Organika-Assoziaten werden nach zeitlicher Verzögerung durch Wartungsarbeiten an den Inertgas-Handschuhboxen gestartet.
- | — Weiterführung der Experimente zum photodynamischen Verhalten von Huminstoffen in Abhängigkeit des Redox-Zustandes bzw. von Actiniden/ Lanthaniden-Huminstoff-Komplexen (Kooperation mit Universität Potsdam).
- | — Fortführung der Grundlagenuntersuchungen zur Redoxchemie von Neptunium mit Hydrochinonen und Huminstoffen.

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 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 275.839,00 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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die Untersuchungen zum fundamentalen Verständnis von intramolekularen Energietransferprozessen in Huminstoff-Lanthanoid-Systemen wurden fortgeführt. Dazu wurden verschiedene niedermolekulare Modellliganden (z. B. Salicylsäure, Glykolsäure sowie weitere aliphatische und aromatische Carbonsäuren) lumineszenzspektroskopisch in Komplexen mit Eu(III) untersucht. Die Lumineszenz der Komplexe wurde im Temperaturbereich $80 \text{ K} < T < 293 \text{ K}$ gemessen und hinsichtlich der Temperaturabhängigkeit des Asymmetrieverhältnisses, der Energie des ${}^5\text{D}_0$ - ${}^7\text{F}_0$ -Übergangs sowie der Lumineszenzabklingzeit ausgewertet.

Tonminerale-Systeme (kolloidal und als Festphase) wurden mit Europium als Lumineszenzsonde markiert. In den komplexen Mehrphasen-Systemen wurden (und werden) zeitaufgelöste Lumineszenzmessungen durchgeführt. Aus den spektroskopischen Parametern (Lumineszenzabklingzeit, Asymmetrieverhältnis und Energie des ${}^5\text{D}_0$ - ${}^7\text{F}_0$ -Übergangs) lassen sich Rückschlüsse auf die Koordination des Eu(III) Ions ziehen.

- AP2: In der Transientenabsorptionsspektroskopie wurden Tripletzustände und Radikationen (z. B. Phenoxyradikal und solvatisierte Elektronen) der Salicylsäure in An- und Abwesenheit verschiedener Metallionen (Terbium, Europium, Kupfer, Magnesium, Calcium) untersucht. Redoxaktive Metalle (Europium, Kupfer) löschen den Tripletzustand bzw. reagieren mit den solvatisierten Elektronen, während andere Metalle (z. B. Terbium) nur den Tripletzustand löschen. Letzteres ist ein direkter spektroskopischer Nachweis für die intramolekulare Sensibilisierung („Antenneneffekt“) der Liganden.
- AP3: Die intrinsische Huminstofffluoreszenz wurde mit Hilfe der zeitkorrelierten Einzelphotonenzählung (time-correlated single photon counting) bei verschiedenen Emissionswellenlängen in An- und Abwesenheit von Europium(III) untersucht. Die Fluoreszenzabklingkurven - gemessen unter „magic-angle“ Bedingungen - wurden global nach verschiedenen kinetischen Modellen hinsichtlich der Beteiligung von Energie- und Elektronentransferprozessen am Fluoreszenzabklingverhalten der intrinsischen Huminstofffluoreszenz ausgewertet.
- AP4: Die Komplexierungskinetik von Eu(III) durch Huminstoffe verschiedener Ursprungsorte wurde in stopped-flow Experimenten anhand der Löschung der intrinsischen Huminstofffluoreszenz untersucht und mittels geeigneter empirischer kinetischer Modelle beschrieben.
- AP5: Mit der Messung von zeitaufgelöste Eu-Lumineszenzspektren in Gegenwart verschiedener Metallionen (Ca, Mg, Cu) und HS, wurde Komplexierung bzw. Verdrängung von Eu(III) aus den Huminstoffkomplexen untersucht. In den Experimenten wurde die Eu-Lumineszenz indirekt über den Liganden angeregt. Die Sensibilisierung der Eu-Lumineszenz war sehr effektiv und garantierte, dass nur im Komplex gebundenes Europium detektiert wurde.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: In diesem Arbeitspaket werden zeitaufgelöste Lumineszenzuntersuchungen von Europium in kolloidalen Systemen durchgeführt. Aus den photophysikalischen Parametern sollen Informationen zu den intrinsischen Eigenschaften von Europium-Ionen in diesen Systemen gewonnen werden, z. B. zu intramolekulare Deaktivierungsprozessen.
- AP2: Nach der Integration der iCCD-Kamera an das bestehende System müssen jetzt die entsprechenden experimentellen Parameter bestimmt werden, um das System hinsichtlich einer notwendigen Spezifikation zu beschreiben. Aktuell werden Messungen der Tripletzustände von (Modell)liganden (demnächst sollen auch Modellpolymere und Huminstoffe versucht werden) mit diesem erweiterten experimentellen Aufbau untersucht.
- AP3: Aufnahme von zeitaufgelösten Emissionsspektren der intrinsischen Huminstofffluoreszenz in An- und Abwesenheit verschiedener Metallionen. In diesen Experimenten werden die kinetischen Modelle, die eine Beschreibung der intrinsischen Huminstofffluoreszenz getestet und gegebenenfalls modifiziert werden. Dazu ist geplant neben den Referenz-Huminstoffen auch Fraktionen, die durch Größenausschluss-Chromatographie gewonnen wurden, in die Untersuchungen mit einzubeziehen.
- AP4: Die stopped-flow-Experimente werden fortgesetzt, dabei soll die Komplexierungskinetik von Modellpolymeren und mit Huminstoffen verschiedener Ursprungsorte weitergeführt werden. Für die Messungen mit Huminstoffen wird nicht nur die komplette intrinsische Fluoreszenz verwendet, denn die Messungen sollen in unterschiedlichen Spektralbereichen durchgeführt werden. Mit diesen spektral aufgelösten stopped-flow Experimenten wird ein besseres Verständnis der an der Komplexierung beteiligten (Chromophor)Untereinheiten abzuleiten sein.
- AP5: Fortsetzung der Fluoreszenzuntersuchungen zur Konkurrenz unterschiedlicher Metallionen um Bindungsplätze in Huminstoffen. Einerseits werden Europium bzw. Kupfer aber auch Magnesium und Calcium untersucht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Bettina Marmodée, Joost de Klerk, Freek Ariese, Cees Gooijer, Michale U. Kumke: Metal binding by humic substances – characterization by high resolution lanthanide ion probe spectroscopy (HR-LIPS), *Zeitschrift für Naturforschung* 64a (2009) 242 - 250.

Bettina Marmodée, Joost de Klerk, Freek Ariese, Cees Gooijer, Michael U. Kumke: High-resolution steady-state and time-resolved luminescence studies on the complexes of Eu(III) with aromatic or aliphatic carboxylic acids, *Analytical Chimica Acta, special edition: "Fundamental and Applied Analytical Science"*, doi:10.1016/j.aca.2009.06.006 (2009).

Stefanie Kuke, Bettina Marmodée, Uwe Schilde, Michael U. Kumke: Intramolecular deactivation processes in complexes of 2-hydroxy benzoic acid and glycolic acid with Eu(III), eingereicht zur Veröffentlichung.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10236	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2006 bis 30.10.2009		Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 209.500,00 EUR		Projektleiter: Wieczorek	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben werden Rechenmodelle mit thermisch, hydraulisch und mechanisch gekoppelten Stoffansätzen zur Beschreibung der Langzeitentwicklung der Auflockerungszone (Extension Disturbed Zone EDZ) um Hohlräume in Endlagern für radioaktive Abfälle im Salzgestein überprüft und auf Basis gezielter Laborversuche weiterentwickelt. Sofern in Auswertung der Laborversuche und Modellrechnungen notwendig, ist beabsichtigt, sicherheitlich relevante Eigenschaften und Prozesse in die PA-(Performance Assessment) Modelle zu übernehmen.

Das Vorhaben wird im Rahmen des Projektes THERESA von der Europäischen Union gefördert und vom Projektträger PTKA-WTE co-finanziert. Das oben genannte deutsche Verbundprojekt umfasst die Arbeiten der GRS, Bereich Endlagersicherheitsforschung in Braunschweig, der DBE Technology in Peine und des IfG Leipzig.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erstellung eines Fragen- bzw. Aufgabenkatalogs (Issue Evaluation Table – IET) für die zielorientierte Bewertung und Verbesserung der Leistungsfähigkeit der vorhandenen Codes bzw. Modelle (wird von GRS und DBE Technology bearbeitet)
- AP2: Datensammlung zur Modellierung der Entwicklung und Rückbildung der EDZ sowie von hydraulisch-mechanischen Wechselwirkungen
- AP3: Modellkalibrierung und Integration der konstitutiven Modelle in die Rechencodes
- AP4: Benchmark-Laborversuch und Rechnungen mit dem modifizierten Stoffgesetz
- AP5: Durchführung von PA-Rechnungen unter Berücksichtigung der EDZ-Entwicklung (wird von GRS bearbeitet)
- AP6: Berichtserstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP4: Die Messdaten des Benchmarkversuchs mit einer ungelochten Salzprobe sowie des ursprünglich für den Benchmark geplanten Versuchs mit einer großen gelochten Salzprobe wurden den Modellierungsteams Ende März zur Verfügung gestellt. In einem Bericht (Deliverable D7 des THERESA-Projekts) sind sämtliche Laborversuche zusammengestellt.

Die Modellierungsteams von IfG, CIMNE, DBETEC, TU Clausthal, FZK-INE, NRG und BGR haben in unterschiedlichem Umfang im ersten Halbjahr 2009 zunächst eine Blind Prediction und anschließend eine Interpretationsmodellierung der Versuche vorgenommen. Die Ergebnisse wurden bei einem Projekt-Meeting am 26. Juni 2009 präsentiert. Die Beiträge für das Deliverable D8, das die Ergebnisse dieser Arbeiten zusammenstellt, werden zurzeit gesammelt; ein Entwurf für D8 besteht bereits.

AP5: Zur Festlegung der Randbedingungen und der zu betrachtenden Szenarien wurden im April und Juni 2009 zwei Videokonferenzen unter Teilnahme von GRS, DBETEC und NRG durchgeführt. Nach derzeitigem Stand soll die Umgebung eines Streckenverschlusses für vier Fälle (Verschlusseinbau in eine Strecke nach bzw. ohne Nachschneiden der Streckenkontur, am Verschluss unter Druck anstehende Lauge sofort bzw. 50 Jahre nach Verschlusseinbau) betrachtet werden. Die für die PA-Codes nötigen Eingabedaten zur Permeabilitätsentwicklung in der EDZ müssen Prozesslevel-Rechnungen mit den in AP3 kalibrierten Modellen liefern. Entsprechende Rechnungen mit CODE_BRIGHT werden zurzeit von GRS durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fertigstellung des Deliverables D8 (Modellierung des Benchmark-Laborversuchs).
- Durchführung von PA-Rechnungen zu einem Endlager-Referenzfall mit Berücksichtigung der Ergebnisse von AP4.
- Kombiniertes TIMODAZ-THERESA-Workshop im September/Oktober 2009.
- Abschlussbericht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang, C.-L., Wieczorek, K., Rothfuchs, T. (2009): Laboratory Benchmark Tests on Rock Salt, Deliverable D7 of the THERESA project.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10246	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2006 bis 30.10.2009		Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 74.878,00 EUR		Projektleiter: Lerch	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben werden Rechenmodelle mit thermisch, hydraulisch und mechanisch gekoppelten Stoffansätzen zur Beschreibung der Langzeitentwicklung der Auflockerungszone (Extension Disturbed Zone EDZ) um Hohlräume in Endlagern für radioaktive Abfälle im Salzgestein überprüft und auf Basis gezielter Laborversuche weiterentwickelt. Sofern in Auswertung der Laborversuche und Modellrechnungen notwendig, ist beabsichtigt, sicherheitlich relevante Eigenschaften und Prozesse in die PA-(Performance Assessment) Modelle zu übernehmen.

Das Vorhaben wird im Rahmen des Projektes THERESA von der Europäischen Union gefördert und vom Projektträger PTKA-WTE co-finanziert. Das oben genannte deutsche Verbundprojekt umfasst die Arbeiten der GRS, Bereich Endlagersicherheitsforschung in Braunschweig, der DBE Technology in Peine und des IfG Leipzig.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erstellung eines Fragen- bzw. Aufgabenkatalogs (Issue Evaluation Table – IET) für die zielorientierte Bewertung und Verbesserung der Leistungsfähigkeit der vorhandenen Codes bzw. Modelle (wird von GRS und DBE Technology bearbeitet)
- AP2: Datensammlung zur Modellierung der Entwicklung und Rückbildung der EDZ sowie von hydraulisch-mechanischen Wechselwirkungen
- AP3: Modellkalibrierung und Integration der konstitutiven Modelle in die Rechencodes
- AP4: Benchmark-Laborversuch und Rechnungen mit dem modifizierten Stoffgesetz
- AP5: Durchführung von PA-Rechnungen unter Berücksichtigung der EDZ-Entwicklung (wird von GRS bearbeitet)
- AP6: Berichterstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zu den Arbeitspaketen 1 und 2 wurden im Berichtszeitraum planmäßig keine Arbeiten durchgeführt.

AP3:

Die Entwicklung eines dilatanzfähigen Stoffgesetzes wurde abgeschlossen. Dazu wurde ausgehend vom Programmcode des WIPP-Gesetzes ein Modell implementiert, das elastische Verhalten, Versetzungskriechen, transientes Kriechen und zwei unterschiedliche Ansätze für das Dilatanzverhalten beinhaltet. In der ersten Variante wurde die von Olivella in Deliverable 6 vorgeschlagene Erweiterung mit linearer Abhängigkeit vom mittleren Druck und von der effektiven Spannung realisiert. Berechnungen mit dieser Variante konnten jedoch nur ohne Belastungsumkehr erfolgreich durchgeführt werden. Die zweite Variante stellt eine Modifikation des Ansatzes von FZK/INE mit quadratischer Abhängigkeit in den beiden o. g. Spannungsgrößen dar. Diese Variante verhält sich im Berechnungscode FLAC3D numerisch stabiler. Für dieses modifizierte Stoffgesetz mussten zusätzlich noch geeignete Wertebereiche der Parameter gefunden werden, wobei allerdings wegen der anstehenden Arbeiten zu AP4 keine Parameteroptimierung im Sinne einer mathematischen Zielfunktion durchgeführt werden konnte.

AP4:

Eine „blind prediction“ des im Projekt vereinbarten Benchmarktests konnte mit dem Stoffgesetz, welches das „lineare“ Dilatanzmodell beinhaltet, wegen des o. g. Verhaltens nur so weit durchgeführt werden, wie der axiale Druck unverändert blieb oder zunahm. Mit dem „quadratischen“ Modell konnte der Benchmarktest vollständig simuliert werden.

Nach der Veröffentlichung der an der Probe gemessenen Labordaten durch den Projektpartner GRS wurde an dem quadratischen Dilatanzmodell eine Verbesserung der Materialparameter durchgeführt. Die Ergebnisse stimmen in der Tendenz mit dem gemessenen Verhalten überein und liegen im Streubereich der Ergebnisse aller Projektpartner, wie ein Ergebnisvergleich anlässlich der Präsentation im Rahmen des WP3 task force meeting im Juni 2009 in Braunschweig zeigte. Für eine Anwendung im Langzeitsicherheitsnachweis muss die Prognosegüte jedoch noch verbessert werden.

Mit keiner der beiden Varianten war es möglich, den sehr komplexen Fall des „large BMT“ (Hohlzylinder) zu simulieren, da die unterschiedlichen Übergänge im Belastungspfad nur begrenzt numerisch zu bewältigen waren.

Die Zuarbeiten zu D8 sind dem Projektkoordinator des WP 3 fristgerecht zugesandt worden.

AP5:

Im Projekt ist vereinbart worden, dass die DBE TECHNOLOGY sich an der Definition der durchzuführenden PA-Berechnungen beteiligt. Die dazu erforderlichen Zuarbeiten einschließlich begleitender Berechnungen wurden geleistet, den am AP teilnehmenden Partnern zugesandt und im Rahmen von Videokonferenzen diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Aktualisierung der Issue Evaluation Table

AP5 + AP6: Abschließende Definitionen für die PA-Berechnungen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Gemeinschaftliche Veröffentlichungen im Rahmen der TIMODAZ/THERESA-Konferenz 2009:

- Evaluation and Improvement of Numerical THM Modelling Capabilities for Rock Salt Repositories (THERESA project)
- Data Compilation and Lab Testing for Calibration and Improvement of Numerical THM Models for Rock Salt Repositories in the Frame of THERESA

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstraße 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 10256
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2006 bis 30.10.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 62.389,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kamlot	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben werden Rechenmodelle mit thermisch, hydraulisch und mechanisch gekoppelten Stoffansätzen zur Beschreibung der Langzeitentwicklung der Auflockerungszone (Extension Disturbed Zone EDZ) um Hohlräume in Endlagern für radioaktive Abfälle im Salzgestein überprüft und auf Basis gezielter Laborversuche weiterentwickelt. Sofern sich in Auswertung der Laborversuche und Modellrechnungen die Notwendigkeit ergibt, ist beabsichtigt, sicherheitlich relevante Eigenschaften und Prozesse in die PA-(Performance Assessment) Modelle zu übernehmen.

Das Vorhaben wird im Rahmen des Projektes THERESA von der Europäischen Union gefördert und vom Projektträger PTKA-WTE co-finanziert. Das oben genannte deutsche Verbundprojekt umfasst die Arbeiten der GRS, Bereich Endlagersicherheitsforschung in Braunschweig, der DBE Technology in Peine und des IfG Leipzig.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erstellung eines Fragen- bzw. Aufgabenkatalogs (Issue Evaluation Table IET) für die zielorientierte Bewertung und Verbesserung der Leistungsfähigkeit der vorhandenen Codes bzw. Modelle (wird von GRS und DBE Technology bearbeitet)
- AP2: Datensammlung zur Modellierung der Entwicklung und Rückbildung der EDZ sowie von hydraulisch-mechanischen Wechselwirkungen
- AP3: Modellkalibrierung und Integration der konstitutiven Modelle in die Rechencodes
- AP4: Benchmark-Laborversuch und Rechnungen mit dem modifizierten Stoffgesetz
- AP5: Durchführung von PA-Rechnungen unter Berücksichtigung der EDZ-Entwicklung (wird von GRS bearbeitet)
- AP6: Berichterstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Nach Abschluss der Arbeiten für das Arbeitspaket 3 wurden im Arbeitspaket 4 vom IfG Leipzig im ersten Halbjahr 2009 folgende Ergebnisse erzielt:

Anlässlich des Task Force Meetings am 28. Januar bei der GRS in Braunschweig erfolgte eine gemeinsame Festlegung der durchzuführenden Benchmark-Versuche (BMT) am Speisesalz Asse unter unterschiedlichen Belastungszuständen und Temperaturen, bei denen in Abhängigkeit von der Dilatanz die Gaspermeabilität ermittelt werden sollte. Die zylindrischen Proben sollen ein Volumenelement in der Kontur einer Einlagerungstrecke im Steinsalz repräsentieren. Mit den im Arbeitspaket 3 verwendeten Materialparametern wurde mit dem Stoffansatz Günther-Salzer bis Ende März ein BMT A in einer „Blind Prediction“ berechnet. Nach Übergabe der Versuchsergebnisse zur Deformation und Permeabilität zeigte sich, dass die Prognoserechnung zwar qualitativ die richtigen Resultate lieferte, mittels einer Anpassung der Kriechparameter aber eine signifikante Verbesserung der Übereinstimmung zwischen Versuch und Rechnung erzielt werden konnte. Mit dem angepassten Parametersatz erfolgte weiterhin die Simulation eines BMT B, wobei die berechneten Deformationen und Permeabilitäten sehr gut mit den Messwerten übereinstimmten. Als Basis für die Permeabilitätsermittlung diente die berechnete plastische volumetrische Deformation. Die Temperaturendeckung der Probe wurde im thermisch-mechanisch gekoppelten Rechenmodus von FLAC bestimmt.

Die Resultate der Benchmark-Rechnungen wurden anlässlich des Task Force Meetings am 26. Juni bei der GRS in Braunschweig präsentiert bzw. in der schriftlichen Zuarbeit zu Deliverable 8 „Report on code/model application on large-scale laboratory test (BMT)“ zusammengefasst.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Weiterarbeit im Arbeitspaket 4 ist geplant gemäß dem Arbeitsplan mit den Schwerpunkten:

- Erstellung des Posterbeitrages „EDZ Relevant THM Processes in Salt – Numerical Tools and Back Analyses (THERESA Project)“ zur Konferenz „Impact of THMC-Processes on the Safety of Underground Repositories“ vom 29.09. bis 01.10.2009 in Luxemburg
- Vorbereitung einer PPT-Präsentation zum letzten THERESA Project Plenary Meeting vom 01.10. bis 02.10.2009 in Luxemburg
- Beginn der Erstellung des Abschlussberichtes

5. Berichte, Veröffentlichungen

Mitautor der Beiträge „Data Compilation and Lab Testing for Calibration and Improvement of Numerical THM Models for Rock Salt Repositories in the Frame of THERESA,“ und „Evaluation and Improvement of Numerical THM Modelling Capabilities for Rock Salt Repositories (THERESA project)“, eingereicht für die Tagung 29.09. bis 01.10.2009 in Luxemburg.

Deliverable 8: „Report on code/model application on large-scale laboratory test (BMT)“.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10276
Vorhabensbezeichnung: Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM-		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 31.03.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 778.575,00 EUR	Projektleiter: Dr. Rübel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

WESAM stellt im Wesentlichen das nationale Ko-Vorhaben für die Arbeiten der GRS-Braunschweig im Rahmen des integrierten Projektes (IP) PAMINA dar, das im 6. Rahmenprogramm der Europäischen Union von Oktober 2006 bis September 2009 durchgeführt wird. Das übergeordnete Ziel des IP PAMINA und damit auch von WESAM besteht in der Verbesserung und Harmonisierung von Methoden und Rechenprogrammen für die integrierte Langzeitsicherheitsanalyse für unterschiedliche Konzepte zur Entsorgung langlebiger radioaktiver Abfälle und bestrahlter Brennelemente in tiefen geologischen Formationen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Struktur von WESAM entspricht jener des Projektes PAMINA und beinhaltet vier Arbeitspakete:

Im ersten Arbeitspaket wird ein umfassender Überblick über den internationalen Stand der Methoden und Ansätze bei der Langzeitsicherheitsanalyse und beim Safety Case erarbeitet. Dabei werden auch die Defizite methodischer Natur, bei den eingesetzten Werkzeugen und der Qualität der benötigten Daten identifiziert.

Im zweiten Arbeitspaket erfolgt eine Weiterentwicklung von Methoden für probabilistische Modellrechnungen, wobei vor allem die Methoden zur Bestimmung von Verteilungsfunktionen und neue mathematische Methoden zur Sensitivitätsanalyse untersucht werden.

Im dritten Arbeitspaket werden die Bedeutung von Sicherheitsfunktionen bei der Ableitung von Szenarien und vor allem die Nutzung von Sicherheits- und Funktionsindikatoren für Endlager in Salz- und Tonformationen betrachtet.

Im vierten Arbeitspaket wird die Bedeutung von komplexen Modellansätzen in integrierten Sicherheitsanalysen untersucht. Dies geschieht mit Hilfe vergleichender Rechnungen verschiedener Organisationen und Rechenprogramme. Dabei sollen Einzeleffekte in einem Endlager im Salz betrachtet sowie der Einfluss der Komplexität der Fernfeldmodelle betrachtet werden.

In einigen Punkten geht die Bearbeitungstiefe in WESAM über die von PAMINA hinaus. Dies betrifft die Arbeiten zu den Unsicherheiten, die Sicherheitsindikatoren und die Modellierung mit Hilfe komplexer Modellansätze.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Fertigstellung des Teils „Sensitivitätsanalyse“ zum Bericht Berichts (D1.1.2) des zweiten Blocks der Themengebiete mit Integration der Informationen aller Partner sowie Fertigstellung der Entwürfe der letzten drei Themengebiete „Menschliche Einwirkungen“, „Biosphäre“ und „Kriterien für die Datenauswahl“.
Teilnahme am Treffen des Aktinidenverbands in Leipzig.
- AP2: Abschluss der Rechnungen zur Durchführung von Sensitivitätsanalysen für ein generisches Endlager im Salz auf Basis des Endlagerkonzepts des Projekts ISIBEL mit unterschiedlichen Verfahren zur Berechnung von Sensitivitätsindices. Die von der GRS durchgeführten Rechnungen wurden im Milestone M2.1.D.6 dokumentiert. Dabei wurden auch alternative Darstellungsarten wie CSM plots and cobweb plots getestet. Die Korrelations- und Regressionsbasierten Methoden können gut eingesetzt werden, aber liefern unklare Ergebnisse betreffend der weniger wichtigen Parameter. Die EFAST Methode erfordert ein höheren technischen Aufwand und sollte theoretisch eindeutiger Ergebnisse liefern. Der Einsatz von EFAST löst die Probleme der regressionsbasierten Methoden aber leider nicht. Die Dokumentation der Ergebnisse des gesamten Arbeitspaketes im Deliverable D2.1.D.1 wurde begonnen.
- AP3: Die Berechnungen der Sicherheits- und Performanceindikatoren für ein Endlager im Salz wurden abgeschlossen und in einem PAMINA-internen Arbeitsbericht dokumentiert. Dabei wurden neben der Dosis drei weitere komplementäre Sicherheitsindikatoren erfolgreich getestet. Darunter befand sich auch der bisher nicht betrachtete Indikator der Strahlungsleistung im Aquifer. Mit der Erstellung des Deliverable D3.4.2 zur Integration der Ergebnisse aller Projektpartner im Arbeitspaket 3.4 wurde begonnen.
- AP4: Die Modellierung des Laugenzutritts in eine mit Salzgrus versetzte Strecke mit den Programmen Hydrus, Feflow und LOPOS wurde abgeschlossen. Es zeigt sich, dass das Programm Feflow nicht zur Modellierung dieser Problemstellung geeignet ist. Zwischen den Programmen Hydrus und LOPOS wurde eine zufriedenstellende Übereinstimmung gefunden, so dass eine Weiterentwicklung zur Berücksichtigung dieses Effekts in LOPOS nicht notwendig erscheint. Die Modellierung des konvektiven Schadstofftransports in einer Strecke mit den Programmen REPOS und d³f wurde begonnen.
Die Arbeiten zur Kopplung von r³t / PHREEQC wurden durch das Steinbeis Institut fortgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fertigstellung der Beiträge zu den letzten drei Themengebieten „Menschliche Einwirkungen“, „Biosphäre“ und „Kriterien für die Datenauswahl“.
- AP2: Fertigstellung des Deliverable D2.1.D.1.
- AP3: Fortsetzung der Arbeiten zur Berechnung der Sicherheitsindikatoren für das Endlagersystem im Tonstein.
- AP4: Fertigstellung der Arbeiten zur Modellierung des konvektiven Schadstofftransports. Fortsetzung der Arbeiten zur Kopplung von r³t und PHREEQC.

5. Berichte, Veröffentlichungen

D.-A. Becker, S. Spießl, R. Bolado-Lavin: Application of Different Sensitivity Analysis Methods to a PA Model for a Repository in Rock Salt. PAMINA Milestone M2.1.D.6.

Zuwendungsempfänger: Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Regina-Pacis-Weg 3, 53113 Bonn		Förderkennzeichen: 02 E 10296
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Visualisierung und 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 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 82.938,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Rumpf	

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 Projekte 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 effizient 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 aufzubereiten 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 (Dr. E. Fein), der Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Freiburg (Prof. Kröner) 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 bearbeitet:

AP9: Visualisierung und Datenanalyse (Arbeitsgruppe Rumpf)

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 und erweiterten Datenformaten für Segmente und Klüfte weiterentwickelt. Das Projekt wurde auch in diesem Berichtszeitraum in enger Zusammenarbeit von Frau Dipl. Math. Nadine Olischläger mit der Arbeitsgruppe Kröner in Freiburg bearbeitet.

Im Zusammenhang mit den Visualisierungswerkzeugen wurden folgende Arbeiten durchgeführt:

Zum Statustreffen im April 2009 wurden verschiedene Integrationsmethoden in GRAPE implementiert. Es ist nun möglich über eines vom Benutzer über die Eckpunkte angegebenes boxenförmiges Gebiet zu integrieren. Im Projekt „probe“ können nun auch Volumenströme bilanziert werden. Die Bilanzierung läuft über den Modellrand oder Teile des Randes, die in 2D über vom Benutzer über vorgegebene Linien vorgeschrieben wird. Außerdem fehlte die Möglichkeit Massenströme zu bilanzieren. Dazu wurde eine Massenintegrationsmethode über Subdomains in 2D und 3D implementiert. Zusätzlich ist nun auch die Bilanzierung von Konzentration mal Geschwindigkeit in 2D über vom Benutzer vorgegebene Linien möglich. Die isoline Methode wurde dahin gehend erweitert, dass es nun auch möglich ist im Gridmodus eine beliebige Anzahl von Isolinien im x-y Bereich anzugeben. Dies war nur schwer, bzw. in 2D-Fällen mitunter gar nicht möglich, wird aber für die Darstellung der Trinkwassergrenze gebraucht.

Das Visualisierungswerkzeug für Kluftoberflächen in GRAPE wurde auf degenerierte Elemente erweitert. Auch hier stehen die Kluftgeometrien nur implizit zur Verfügung. In einem Postprocessing-Schritt werden nun auch die Kluftgeometrien der degenerierten Randelemente rekonstruiert und in einem passenden Datenformat, welches in GRAPE implementiert wurde, gespeichert. Neben der eigentlichen Visualisierung der Kluftgeometrien können auch hier Daten in bzw. an der Kluft dargestellt werden. Auch diese Daten sind nur implizit gegeben und werden aus den Datendateien generiert und in passenden Datenformaten gespeichert. An der Berücksichtigung von Verzweigungspunkte in einer Kluft wurde weiter gearbeitet.

Es wurden schnelle Methoden zur Segmentierung basierend auf konvexer Optimierung und Schwellwertflächenextraktion entwickelt und implementiert, die nun zum Einsatz kommen sollen in der Segmentierung und Cluster-Analyse von Strömungsfeldern.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise weitergeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
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 (Dr. E. Fein), der Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Freiburg (Prof. Kröner) 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:

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 ersten neuen Datenformaten weiterentwickelt. Bearbeitet wurde das Projekt von Herrn Mirko Kränkel (AG Kröner) in enger Zusammenarbeit mit Frau Dipl. Math. Nadine Olischläger (AG Rumpf).

Im Zusammenhang mit den Visualisierungswerkzeugen wurden folgende Arbeiten durchgeführt:

In Absprache mit der Arbeitsgruppe Wittum, wurden die neuentwickelten Kluftzeichnungs-Routinen weiterentwickelt und an die in r^3t und d^3f implementierten Realisierungen der Klüfte als degenerierte Elemente angepasst. Das Problem der Verzweigungspunkte ist mit diesen neuen Darstellungsverfahren gelöst.

Die weiteren Arbeiten in diesem Abschnitt fanden in erster Linie im Bereich Post-Processing statt. Bisher in Grape vorhandene Bilanzierungs- und Integrationstools wurden im Hinblick auf die Benutzung in 2D als auch 3D erweitert und in ihrer Funktionalität und Handhabung verbessert.

In Absprache mit der Arbeitsgruppe Wittum wurde begonnen die Grape-Methoden für Visualisierung und Post-Processing im Hinblick auf die Verwendung von Diskretisierungsmethoden höherer Ordnung zu erweitern.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Auftrag angegebenen Vorgehensweise weitergeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 10316
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 82.404,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Attinger	

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. 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 Freiberg (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. 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 Gruppe Attinger (Universität Jena) bearbeitet:

- AP5: Skalierung von halinen und thermohaliner Strömungen in heterogenen geologischen Medien
- WP1: Stabilitätsanalyse von halinen und thermohalinen Strömungen in heterogenen geologischen Medien
- WP2: Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen in heterogenen geologischen Medien

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Es wurden numerische Simulationen sowohl für das Elder Problem als auch für das Schincariol Problem in heterogenen Böden durchgeführt. Parameter wie Korrelationslänge, Erwartungswert und Streuung wurden variiert, um ihren Einfluss auf die Stabilität des Problems zu bestimmen. Eine kritische 'mixing length', die die Grenze zwischen stabilen und nicht stabilen Strömungen markiert, wurde für jeden Parametersatz laut Coskuner & Bensen 1990 berechnet.
- Als nächstes wurden effektive Dispersionkoeffizienten wie in Held et al. 2005 bestimmt. Das liefert uns einen zusätzlichen Hinweis bzgl. der Stabilität des Problems. Die Ergebnisse wurden mit denen auf den kritischen 'mixing length' basierenden Stabilitätsaussagen verglichen.

Ergebnisse:

- Die Ergebnisse für das Elder Problem sind konsistent mit der Theorie. Die effektiven Diffusionskoeffizienten wurden mit dem Ergebnis von Welty 1991 verglichen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt. Zunächst ist geplant:

- Der Abschnitt 'stability of density-driven flows in heterogenous media' wird abgeschlossen.
- Als nächster Schritt werden dann die Temperatureffekte im Stabilitätskriterium berücksichtigt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Das Paper *An extended stability criterion for density-driven flows in homogeneous media* by J. L. Musuza S. Attinger, and F.A. Radu ist in *Advances in Water Resources* 32(2009) pp. 796-808 erschienen.

Ein Poster *A stability criterion for heterogeneous density-driven flows* wurde beim EGU General Assembly in April 2009 präsentiert.

Ein Vortrag *A stability criterion for heterogeneous density-driven flows* wurde bei der SIAM Konferenz: Computational Geosciences, Leipzig, 15-19.06.2009 gehalten.

Ein Vortrag wurde beim EduR Statustreffen im April gehalten.

Ein Vortrag *The stability of density-driven flows in heterogeneous media* ist beim Deutsche Bodenkunde Gesellschaft Treff im September 2009 geplant.

Ein Abstrakt *An extended stability criterion for flow in porous media: the heterogeneous case* wurde in einem Symposium an der Uni Stuttgart eingereicht.

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 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
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 .

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

Das bisher erarbeitete Modell zur thermohalinen Strömung wurde im Bereich der Thermodiffusion überarbeitet und zum Abschluss gebracht. Testrechnungen mit der Implementierung dieses Modells innerhalb von d^3f wurden durchgeführt. Bei den Testfällen handelte es sich a) um ein Mischungsproblem (leichte Schicht mit wenig Salz und kleiner Temperatur über schwerer Schicht mit viel Salz und höherer Temperatur) und b) um eine Soret-Zelle (homogene Salz- und Temperatur-Verteilung zu Beginn, die einem Temperatur-Gradienten ausgesetzt wird). Fall a) wurde einmal mit und einmal ohne Soret-Effekt gerechnet. Mit Soret-Effekt wächst der durch Diffusion entstehende Mischungsbereich am Interface minimal (kleiner einstelliger Prozentbereich) schneller. Fall b) soll zeigen, dass der angelegte Temperatur-Gradient einen Konzentrations-Gradienten erzeugt, bis sich beide das Gleichgewicht halten. Hierbei entsteht unter den gewählten Bedingungen eine maximale Abweichung von der Anfangskonzentration von 3 %. Insgesamt zeigt sich, dass die Effekte der Thermodiffusion ca. ein bis zwei Größenordnungen kleiner als die der gewöhnlichen Diffusion sind. Insbesondere sind sie nur in speziellen diffusions-dominierten Problemen sichtbar.

Die Implementierung von Diskretisierungsverfahren höherer Ordnung in das Programm d^3f wurde begonnen. Zunächst wurden notwendige Strukturen im Kern des Software-Paketes eingebaut, die die Freiheitsgrade und Ansatzfunktionen für die Verfahren höherer Ordnung zur Verfügung stellen. Diese Ergänzung verändert die Grundstruktur des Programms an einigen Stellen erheblich, so dass man nicht gleichzeitig sowohl das Standard-Verfahren als auch die Verfahren höherer Ordnung verwenden kann. Daher ist es möglich über das Compiler-Flag „FVHO_MODE“ die neuen Strukturen an- und abzuschalten und so zwischen Verfahren linearer und höherer Ordnung zu wechseln. Um die neuen Verfahren zu testen, wurde ein einfaches Konvektions-Diffusions-Problem gewählt. Die numerischen Ergebnisse zeigen die gewünschte bessere Konvergenzrate. Ebenfalls wurde damit begonnen die für das Problem der dichtegetriebenen Grundwasserströmung relevanten Gleichungen mit höheren Ansätzen zu diskretisieren. Erste numerische Ergebnisse für das Elder-Test-Problem konnten erzielt werden.

Das FAMG-Verfahren wurde weiterentwickelt und an Modellproblemen getestet. Schwerpunkt stellte das Saltpool-Experiment für die dichtegetriebene Strömung dar. Das algebraische Verfahren erwies sich als geringfügig robuster als das geometrische. Es zeigte sich, dass es vorteilhaft ist, diagonale statt voller Blockmatrizen zu verwenden. Unterstützt wurde die Untersuchung durch theoretische Analyse, welche die analytische Linearisierung berücksichtigt. Ein weiterer Fokus lag auf der Beschleunigung der Algebra. Bekanntermaßen stellt hier die geringe Datenlokalität der Algebra in der UG-Bibliothek das Hauptproblem dar. Es wurde ein Konzept entwickelt, um an dieser Stelle Abhilfe zu schaffen. Dazu ist es jedoch nötig, die Algebra komplett aus dem Gittermanager herauszulösen, so dass große Umstrukturierungen am Kern der Software erforderlich sind. Um die Rückwärtskompatibilität zu erhalten, müssen alle Makros für Zugriffe auf die algebraischen Datenstrukturen erhalten bleiben.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Auftrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 31.03.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.288.348,00 EUR	Projektleiter: Dr. Fein	

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 Wirtsfformationen 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 Freiberg (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
- AS4: Erstellung eines gemeinsamen Abschlussberichtes, Fortschreibung der Anwenderhandbücher und der Testfallsammlungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In den Gleichungen für die Dichteströmung innerhalb von Klüften wurde die Beschreibung der Schwerkraft so geändert, dass Artefakte an den Kluftgrenzen vermieden werden. Weiterhin wurde die Formulierung der Gleichungen dahingehend modifiziert, dass anstelle des Massenbruchs nun die Konzentration Primärvariable ist. Dies führt zu erheblichen Vereinfachungen in der theoretischen Herleitung der Differentialgleichungen mit reduzierter Dimension für die Klüfte. Tests anhand von Beispielen mit analytischer Lösung zeigten, dass die Änderungen zu einer Erhöhung der Genauigkeit geführt haben.

Zusätzliche Programme zur 3D-Gittergenerierung für einfache Geometrien wurden implementiert. In einem Arbeitsgespräch zur 3D-Gittergenerierung für komplizierte Geometrien wurden Details zur Weiterentwicklung des Gittergenerators ARTE festgelegt.

An der Detailplanung „Enhancement of the Computer Codes d^3f and r^3t (E-DuR); Elaborated Technical Concept“ wurde weitergearbeitet. Parallel dazu wurden für die Auftragsvergabe die ersten Anforderungen an die graphische Oberfläche definiert. Randbedingung hierfür ist, dass die bisherigen Eingabedateien in ihrer Struktur erhalten bleiben, ergänzt und möglichst wenig verändert werden.

Die Identifikation möglicher Testfälle zur Überprüfung der Erweiterungen wurde fortgesetzt. Gefundene Testfälle wurden an die entsprechenden beteiligten Institutionen weitergeleitet.

Am 20. und 21. April 2009 fand in Maulbronn das 5. Statusgespräch statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über die bereits erfolgten und die für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Str., 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 E 10357
Vorhabensbezeichnung: Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2007 bis 31.03.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 798.105,00 EUR	Projektleiter: Dr. Curtius	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Aquatische Phasen, die in den Wirtsgesteinsformationen möglicher Endlager vorliegen, bedingen die Korrosion von Forschungsreaktor-Brennelementen (FR-BE). Die durch die Korrosion gebildeten sekundären Phasen binden die mobilisierten Radionuklide und verhindern bzw. verzögern dadurch ihre Freisetzung. Um verlässliche Aussagen im Hinblick auf eine langfristige sichere Endlagerung der FR-BE geben zu können, soll das Projekt dazu beitragen:

- a) das Korrosionsverhalten verschiedener FR-BE- Typen in unterschiedlichen aquatischen Phasen zu beschreiben,
- b) die kristallinen Bestandteile der entstandenen sekundären Phasen zu identifizieren und
- c) die Wechselwirkungen der Radionuklide mit den kristallinen Bestandteilen auf molekularer Ebene detailliert zu beschreiben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Auslaugversuche mit **bestrahlten** FR-BE unterschiedlicher Zusammensetzung in unterschiedlichen Formationswässern möglicher Endlager.

AP2: Auslaugversuche mit **unbestrahlten** FR-BE in unterschiedlichen Formationswässern und Identifizierung der kristallinen, sekundären Phasenbestandteile.

AP3: Sorptions- und Inkorporationsuntersuchungen mit endlagerrelevanten Radionukliden an den identifizierten, kristallinen Phasenbestandteilen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Versuche in den Heißen Zellen mit den **bestrahlten** FR-BE-Typen (Dispersionsbrennstoffe: metallisches UAl_x -Al und U_3Si_2 -Al) in Salzlaugen, Tonporenwasser und Wasser aus kristallinem Gestein wurden beendet. Die Lösungen als auch die Korrosionsprodukte (sekundäre Phasen) wurden zwecks Aufarbeitung in eine andere Heiße Zelle überführt.
- AP2: Die sekundären Phasen, entstanden aus der Korrosion **unbestrahlter** FR-BE-Typen (Dispersionsbrennstoffe: metallisches UAl_x -Al und U_3Si_2 -Al) in Salzlauge konnten erfolgreich in mehrere Korngrößenfraktionen getrennt werden. Rasteraufnahmen sowie Auswertungen mittels EDX und XRD belegen eindeutig, dass als kristalline Bestandteile der Lesukit und der Mg-Al-LDH vorhanden sind.
- AP3: Die Inkorporationsversuche mit tri- und tetravalenten Elementen sind abgeschlossen. In allen Versuchen gelang der partielle Austausch des trivalenten Aluminiums. Ergebnisse aus den bisher durchgeführten Sorptionsuntersuchungen mit anionischen Radionuklidspezies zeigen, dass diese „modifizierten“ LDH-Typen bessere Rückhalteeigenschaften als der „reine“ Mg-Al-LDH-Typ aufweisen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Bilanzierung der Radionuklidgehalte in Lösung als auch in den sekundären Phasen in den untersuchten Formationswässern, um für beide FR-BE-Typen eine Klassifizierung von mobilen/immobilen Radionuklidspezies zu erreichen.
- AP2: Identifizierung der gebildeten Uranphase und Quantifizierung der kristallinen Bestandteile für die Systeme:
 a) Salzlauge - UAl_x -Al Probe,
 b) Salzlauge - U_3Si_2 -Al-Probe.
- AP3: Die Bestimmung der Rückhaltekapazitäten der LDH-Typen für kationische Radionuklidspezies in Salzlauge und in Tonporenwasser wird angestrebt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 31.12.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.415.200,00 EUR	Projektleiter: Dr. Buhmann	

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 organi-

siert. Die weiteren Arbeitsschritte dienen dem Anschluss an externe Programme zur statistischen Analyse und zur grafischen Visualisierung von Ergebnissen.

AP5: Test und Dokumentation.

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Arbeitspaket 1 ist weitgehend abgeschlossen. Noch erforderliche Code-Analysen von umzustellenden Programmteilen werden im Rahmen des Arbeitspakets 3 bearbeitet.

Arbeitspaket 2 ist abgeschlossen. Das Konzept für die Programmentwicklungen liegt vor.

Die Module für das Nahfeld, Fernfeld und die Biosphäre werden sukzessive in den modernen Programmiersprachen und entsprechend dem Konzept aus AP2 umgesetzt. Die Erstellung des neuen Moduls für die bisherigen Module der CHET-Familie (Fernfeld) wurde begonnen. Hierzu wird die Programmiersprache C++ eingesetzt. Eine auch für andere Module gültige Klasse für die Eingabe und grafische Darstellung von Nukliddaten wurde entwickelt.

Die Analyse für das Nahfeld-Modul LOPOS hat ergeben, dass es sinnvoll ist, eine Übergangsversion zu erstellen, die noch nicht in der Programmiersprache C++ vorliegen wird. Diese Version wird weiterhin in FORTRAN vorliegen und alle Funktionalitäten der neuen Benutzerumgebung enthalten, so dass sie in der neuen Umgebung mit allen neuen Modulen kombinierbar und mit Datenbankbindung lauffähig ist.

In dem extern vergebenen Auftrag an die Fa. BREDEX wurde die Anbindung an eine Oracle-Datenbank realisiert. Die Bedienungsfläche (GUI) wurde im Entwurf vorgestellt. In wöchentlichen Statusgesprächen zwischen GRS und Fa. Bredex wurde die Entwicklung dieser Software in einer sogenannten „agilen Vorgehensweise“ begleitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Module der CHET-Familie (Fernfeld) sollen in 2009 im Entwurf in der neuen Programmstruktur umgesetzt werden. Danach folgen die Module für die Biosphäre. Der Statistikrahmen wird auf Basis der vorhandenen Version und unter Berücksichtigung der Funktionalität der neuen Benutzerschnittstelle neu konzipiert. Die Arbeiten der Fa. BREDEX zur Datenbankbindung und für die Benutzerschnittstelle werden abgeschlossen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 31.12.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.073.679,00 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 Untertagelabor 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.*

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Mine-By-Test: Die Auffahrung der Nische 2, deren Umgebung durch zahlreiche Messfühler überwacht wurde, wurde von mehreren Modellierungsteams (darunter GRS) numerisch simuliert. GRS hat dabei mit CODE_BRIGHT zunächst grundsätzliche zwei- und dreidimensionale gekoppelte Berechnungen für einen Schnitt durch die Nische durchgeführt. Ein vollständiges 3D-Modell der Nische soll Ende des Jahres zur Verfügung stehen. Bohrlochverformungsmessung: Die Dilatometersonde wurde in einem 18 m tiefen hori-

zontalen Bohrloch parallel zur Schichtung in der DR-Nische im Mont Terri URL eingebaut. Die Daten zur zeitabhängigen Bohrlochverformung, Temperatur und Luftfeuchte werden kontinuierlich registriert. Allerdings arbeitet einer der drei Wegaufnehmer nicht korrekt; es wird versucht, diesen Mangel zu beheben.

Folgende Laborversuche sind zur Untersuchung von Quellung, Verformung, Schädigung und Verheilung von COX- bzw. OPA-Tongestein fortgeführt worden:

- Zwei Quellversuche wurden an zwei COX-Tonproben in Oedometerzellen zur Quellverformung ohne Belastung und zum Quelldruck bei begrenztem Volumen durch Befeuchtung mit synthetischer COX-Ton-Lösung über 9 Monate fortgeführt. Die Wasserbefeuchtung bewirkte eine schnelle Quellverformung von über 6 % innerhalb der ersten Tage und anschließend eine allmähliche Volumenzunahme bis über 7 %. Die Quelldruckmessung zeigte einen maximalen Wert von 3.3 MPa.
- Ein Verheilungsversuch wurde an einem geschädigten OPA-Tonkern in einer neu aufgerüsteten Triaxialprüfanlage durchgeführt. Bei der Kompaktion wurde die Verheilung von Rissen in der Tonprobe durch die Messungen von Gasströmung und Ultraschallgeschwindigkeit beobachtet. Die Gaspermeabilität reduzierte vom Anfangswert von 10^{-16} m^2 auf 10^{-20} m^2 bei einem Manteldruck von 15 MPa, während sich die Schallgeschwindigkeit von 1.0 km/s auf 3.6 km/s erhöhte.
- Die Messungen der Wasserpermeabilität erfolgten durch Injektion von synthetischem Tonwasser in 5 stark geschädigten Tonproben bislang über ein Jahr. Bei einem Manteldruck von 2 MPa und einem Injektionsdruck von 1 MPa war eine ständige Reduzierung der Wasserpermeabilität um zwei bis drei Größenordnungen auf 10^{-19} - 10^{-20} m^2 festgestellt. Die Temperaturerhöhung von 20 auf 60 °C hatte kaum Einfluss auf die Entwicklung der Permeabilität.

Zusätzlich werden weitere Versuche zur Ermittlung der Kriechgrenze und des Quelldrucks/der Quellverformung in Abhängigkeit von der Luftfeuchtigkeit vorgenommen.

Bei der Bestimmung der wärmetechnischen Parameter wurden für Tonstein im naturfeuchten Zustand (Wassergehalt 6.5 %) aus dem URL Mont Terri eine Wärmeleitfähigkeit von $1.95 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ sowie eine Wärmekapazität von $1.28\text{E} - 3 \text{ MJ} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{kg}^{-1}$ und nach Trocknung eine Wärmeleitfähigkeit von $1.42 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ sowie eine Wärmekapazität von $1.42\text{E}-3 \text{ MJ} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{kg}^{-1}$ ermittelt. Mit der Erprobung von Techniken zum horizontalen Einbau von Ton/Sand-Mischungen (SB-Material) im Technikumsmaßstab wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der numerischen Simulationen im Mine-By-Experiment
- Weiterführung des In-situ-Langzeitverformungstests in einem Bohrloch
- Weiterführung der Kriechversuche, Quellversuche und Permeabilitätsmessungen
- Starten weiterer 6 Axial- und 2 Triaxialkriechversuche
- Weiterführung der Bestimmung der thermischen Parameter von Tongesteinsproben und Ton-Sand-Gemischen
- Fortsetzung der Erprobung der Einbautechnik

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang, C-L: Experiments on Swelling of the Callovo-Oxfordian Argillite and the Opalinus Clay, presented on the Workshop of the Rock Mechanics Analysis (RA) – Mont Terri Project, 3-4 June 2009

Zhang, C-L, Wiczorek, K, Xie, M-L: Swelling Experiments on Mudrocks, Inter. Symposium on Unsaturated Soil Mechanics and Deep Geological Nuclear Waste Disposal (UNSAT-WASTE09), 24-26 August 2009, Shanghai, China (to be presented and published)

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10387	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 30.04.2009		Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.04.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 205.565,00 EUR		Projektleiter: Dr. Herbert	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist die Entwicklung eines systematisch hergeleiteten und begründeten Nachweiskonzeptes zum Schutz des Grundwassers vor schädlichen Verunreinigungen durch chemotoxische Stoffe eines Endlagers mit hochradioaktiven Abfällen im Wirtsgestein Salz oder Ton. Alle wichtigen Aspekte des Umgangs mit chemotoxischen Stoffen in einem HAW-Endlager werden untersucht und bewertet. Dazu gehören regulatorische Fragestellungen ebenso, wie Fragen nach dem Inventar solcher Stoffe in den verschiedenen Systemkomponenten eines Endlagers, wie auch die wissenschaftlichen Grundlagen und Methoden zur Stoffbewertung und zur Rückhaltung und Mobilisierbarkeit unter den Randbedingungen relevanter Szenarien. Das vorhandene Wissen zu den unterschiedlichen Aspekten dieser Thematik wird ebenso dargestellt, wie offene Punkte, bzw. zu füllende Lücken.

Zur Bearbeitung dieses komplexen Themas haben das Öko-Institut, DBE Technology und GRS eine Arbeitsgemeinschaft gebildet. Die Gesamtprojektleitung liegt beim Öko-Institut.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das folgende Arbeitsprogramm ist zur Erreichung der Vorhabensziele geplant.

AP1: Regulierung, Vorschriften, Anwendungsfälle - Analyse des Ist-Zustandes (Federführung: DBE Technology GmbH)

AP2: Inventar chemotoxischer Stoffe in einem HAW-Endlager (Federführung: DBE Technology GmbH)

AP3: *Wissenschaftliche Grundlagen (Federführung: GRS)*

AP4: *Randbedingungen für den Nachweis (Federführung: Regulatorische und nachweisbezogene Aspekte: Öko-Institut e. V.; Szenarien: GRS)*

AP5: *Methoden der Stoffbewertung und Identifizierung relevanter Stoffe (Federführung: GRS)*

AP6: Nachweiskonzept für chemotoxische Stoffe (Federführung: Öko-Institut e. V.)

AP7: Koordination (Federführung: Öko-Institut e. V.)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Bearbeitung der Arbeitspakete AP3 bis AP6 wurde im 1. Halbjahr 2009 fortgesetzt und abgeschlossen. Die Berichtsentwürfe wurden in Projektgesprächen mit den Partnern diskutiert. Die Berichte zu AP3 und AP4 und 5, an denen GRS direkt beteiligt war, liegen in der Endfassung vor.

Im ersten Halbjahr 2009 fanden neben den inhaltlichen Arbeiten folgende Gespräche statt:

- 28.01.2009: Statusgespräch zum Projektstatus des Arbeitspakets AP5 und Diskussion über einen Entwurf für eine Nachweisstrategie (AP6).
- 05.03.2009: Statusgespräch über den Stand der Arbeitspakete AP1 bis AP5, die Gliederung des Abschlussberichts und über das Nachweiskonzept AP6.
- 22./23.04.2009: Projektgespräch über den Stand der Arbeitspakete AP1, AP2 und AP4, Diskussion über den Entwurf des Abschlussberichts AP6 und Vorbereitung des Workshops.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Vorlage des gemeinsamen Abschlussberichts erfolgt im 2. Halbjahr 2009.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: Öko-Institut e.V. - Institut für angewandte Ökologie, Merzhauser Straße 173, 79100 Freiburg		Förderkennzeichen: 02 E 10397
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 30.04.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.04.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 248.572,00 EUR	Projektleiter: Sailer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist die Entwicklung eines systematisch hergeleiteten und begründeten Nachweiskonzeptes zum Schutz des Grundwassers vor schädlichen Verunreinigungen durch chemotoxische Stoffe eines Endlagers mit hochradioaktiven Abfällen im Wirtsgestein Salz oder Ton. Alle wichtigen Aspekte des Umgangs mit chemotoxischen Stoffen in einem HAW-Endlager werden untersucht und bewertet. Dazu gehören regulatorische Fragestellungen ebenso, wie Fragen nach dem Inventar solcher Stoffe in den verschiedenen Systemkomponenten eines Endlagers, wie auch die wissenschaftlichen Grundlagen und Methoden zur Stoffbewertung und zur Rückhaltung und Mobilisierbarkeit unter den Randbedingungen relevanter Szenarien. Das vorhandene Wissen zu den unterschiedlichen Aspekten dieser Thematik wird ebenso dargestellt, wie offene Punkte bzw. zu füllende Lücken.

Zur Bearbeitung dieses komplexen Themas haben das Öko-Institut, DBE Technology und GRS eine Arbeitsgemeinschaft gebildet. Die Gesamtprojektleitung liegt beim Öko-Institut.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das nachfolgende Arbeitsprogramm ist zur Erreichung der Vorhabensziele geplant.

AP1: Regulierung, Vorschriften, Anwendungsfälle - Analyse des Ist-Zustandes (Federführung: DBE Technology GmbH)

AP2: Inventar chemotoxischer Stoffe (Federführung: DBE Technology GmbH)

AP3: Wissenschaftliche Grundlagen (Federführung: GRS)

AP4: *Randbedingungen des Nachweises* (Federführung: Öko-Institut e. V. und GRS)

AP5: Methoden der Stoffbewertung und Identifizierung relevanter Stoffe (Federführung: GRS)

AP6: *Nachweiskonzept für chemotoxische Stoffe* (Federführung: Öko-Institut e. V.)

AP7: *Koordination* (Federführung: Öko-Institut e. V.)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im ersten Halbjahr 2009 fanden neben den laufenden inhaltlichen Arbeiten folgende Gespräche statt:

- 28.01.2009 Statusgespräch zum Projektstatus des Arbeitspakets AP5 und Diskussion über einen Entwurf für eine Nachweisstrategie (AP6)
- 05.03.2009 Statusgespräch über den Stand der Arbeitspakete AP1 bis AP5, die Gliederung des Abschlussberichts und über das Nachweiskonzept AP6
- 22./23.04.2009 Projektgespräch über den Stand der Arbeitspakete AP1, AP2 und AP4, Diskussion über den Entwurf des Abschlussberichts AP6 und Vorbereitung des Workshops

Alle AP's wurden im Berichtszeitraum abgeschlossen. Für die AP1 bis AP5 liegen Entwürfe für den Endbericht vor. Für alle AP's, außer AP4 und AP6, lagen zum Ende des Berichtszeitraums diskutierte Endfassungen vor. Die Bearbeitung der Arbeitspakete AP5 und AP6 wurde fortgesetzt und bis zum Ende des Berichtszeitraums erfolgreich abgeschlossen. Die Entwürfe der Abschlussberichte für diese beiden Arbeitspakete wurden im Projektgespräch diskutiert.

Die Bearbeitung des Projekts wurde planmäßig abgeschlossen. Die Abgabe des Abschlussberichts soll früher als erforderlich erfolgen, da der Bericht bereits mit der Einladung zum Workshop versandt werden soll. Bis zur Abgabe des Abschlussberichts sind noch redaktionelle Arbeiten zu erledigen und eine Schlussabstimmung über den Abschlussbericht herbei zu führen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten sind abgeschlossen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Nach Fertigstellung des Endberichts ist vorgesehen, diesen über den geforderten Umfang hinaus in gedruckter Form zu erstellen und durch die Projektpartner zu verteilen, als PDF auf CD-ROM zu pressen sowie ggfs. auch auf den Webseiten der Projektpartner verfügbar zu machen.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10407	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 30.04.2009		Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.04.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 192.707,00 EUR		Projektleiter: Tholen	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist die Entwicklung eines systematisch hergeleiteten und begründeten Nachweiskonzeptes zum Schutz des Grundwassers vor schädlichen Verunreinigungen durch chemotoxische Stoffe eines Endlagers mit hoch radioaktiven Abfällen im Wirtsgestein Salz oder Ton. Alle wichtigen Aspekte des Umgangs mit chemotoxischen Stoffen in einem HAW-Endlager werden untersucht und bewertet. Dazu gehören regulatorische Fragestellungen ebenso, wie Fragen nach dem Inventar solcher Stoffe in den verschiedenen Systemkomponenten eines Endlagers, wie auch die wissenschaftlichen Grundlagen und Methoden zur Stoffbewertung und zur Rückhaltung und Mobilisierbarkeit unter den Randbedingungen relevanter Szenarien. Das vorhandene Wissen zu den unterschiedlichen Aspekten dieser Thematik wird ebenso dargestellt, wie offene Punkte, bzw. zu füllende Lücken.

Zur Bearbeitung dieses komplexen Themas haben das Öko-Institut, DBE Technology und GRS eine Arbeitsgemeinschaft gebildet. Die Gesamtprojektleitung liegt beim Öko-Institut.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das nachfolgende Arbeitsprogramm ist zur Erreichung der Vorhabensziele geplant.

AP1: Regulierung, Vorschriften, Anwendungsfälle - Analyse des Ist-Zustandes (Federführung: DBE Technology GmbH)

AP2: Inventar chemotoxischer Stoffe (Federführung: DBE Technology GmbH)

AP3: Wissenschaftliche Grundlagen (Federführung: GRS mbH)

AP4: Randbedingungen des Nachweises (Federführung: Öko-Institut e. V. und GRS mbH)

AP5: Methoden der Stoffbewertung und Identifizierung relevanter Stoffe (Federführung: GRS mbH)

AP6: Nachweiskonzept für chemotoxische Stoffe (Federführung: Öko-Institut e. V.)

AP7: Koordination (Federführung: Öko-Institut e. V.)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im ersten Halbjahr 2009 fanden neben den laufenden inhaltlichen Arbeiten folgende Gespräche statt:

- 28.01.2009: Statusgespräch zum Projektstatus des Arbeitspakets AP5 und Diskussion über einen Entwurf für eine Nachweisstrategie (AP6).
- 05.03.2009: Statusgespräch über den Stand der Arbeitspakete AP1 bis AP5, die Gliederung des Abschlussberichts und über das Nachweiskonzept AP6.
- 22./23.04.2009: Projektgespräch über den Stand der Arbeitspakete AP1, AP2 und AP4, Diskussion über den Entwurf des Abschlussberichts AP6 und Vorbereitung des Workshops.

AP1 und AP2 sind abgeschlossen. Die Berichte zu AP1 und AP2 liegen in der Endfassung vor.

Die Bearbeitung der Arbeitspakete AP3 bis AP6 wurde im 1. Halbjahr 2009 fortgesetzt. Die Berichtsentwürfe zu AP3 bis AP6 wurden im Projektgespräch diskutiert.

Die Vorlage des gemeinsamen Abschlussberichts erfolgt im 2. Halbjahr 2009.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 30.04.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 293.420,00 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 NaClO_4 , Temperaturen von $20^\circ\text{C} > T > 80^\circ\text{C}$, 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, $20^\circ\text{C} > T > 80^\circ\text{C}$, $3 > \text{pH} > 10$) und unter endlagerrelevanten Bedingungen (Porenwasser)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im ersten Halbjahr 2009 wurden die Arbeiten der spektroskopischen Charakterisierung und Ermittlung thermodynamischer Daten zur Komplexierung von Eu(III)/Am(III) mit verschiedenen sauerstoffhaltigen Huminstoff-Modellliganden fortgeführt (AP2):

- Temperaturabhängige UV-Vis-Untersuchungen zur Eu(III)-Komplexierung mit Weinsäure (I = 0,1 M NaClO₄, pH 2 und 5, 30-50 °C), bisher ermittelte Daten:
 - a) pH = 2, T = 30 °C: EuLH²⁺ mit $\log\beta_{111} = 6,67 \pm 0,04$, $\Delta H_{111} = 6 \pm 3 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\Delta S_{111} = 42 \pm 8 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$
 - b) pH = 5, T = 30 °C: EuL⁺ mit $\log\beta_{110} = 4,03 \pm 0,07$ und EuL²⁻ mit $\log\beta_{120} = 7,01 \pm 0,10$
- Temperaturabhängige TRLFS-Untersuchungen zur Eu(III)/Am(III)-Komplexierung mit Pyromellitsäure, PyS (I = 0,1 M NaClO₄, pH 5, 25-60 °C), bisher ermittelte Daten:
 - a) Eu-PyS, 25 °C: $\log\beta_{11} = 4,70$, $\Delta H_{111} = 18 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\Delta S_{111} = 150 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ (sehr gute Übereinstimmung mit Werten von Choppin et al. J. Coord. Chem. 31, 1994, 297)
 - b) in Arbeit: Am-PyS, $\log\beta_{11} = 5,42$ (TRLFS) bzw. $\log\beta_{11} = 6,07$ (UV-Vis) 25 °C; keine Literaturwerte bekannt
- Erste mikrokalorimetrische Titrations zur Eu(III)-Komplexierung mit Pyromellitsäure bei 25 °C: $\Delta H_{11} = 16,5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\Delta S_{11} = 130 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$. Die ermittelten Daten zeigen sehr gute Übereinstimmung mit Literatur und TRLS-Messungen (s. oben)
- Temperaturabhängige UV-Vis-Untersuchungen zur Am(III)-Komplexierung mit Salicylsäure (I = 0,1 M NaClO₄, pH 4, 30-50 °C); bisher ermittelte Daten für AmL²⁺-Komplex mit $\log\beta_{110} = 2,06 \pm 0,03$, $\Delta H_{11} = 17 \pm 2 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\Delta S_{11} = 92 \pm 7 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ (keine Literaturwerte bekannt)
- Temperaturabhängige UV-Vis-Untersuchungen zur Am(III)-Komplexierung mit Citronensäure (I = 0,1 M NaClO₄, pH 5, 30-50 °C); bisher ermittelte Daten bei 25 °C für:
 - a) AmL²⁺ mit $\log K_{11} = 6,80 \pm 0,03$, $\Delta H_{11} = 28 \pm 8 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\Delta S_{11} = 155 \pm 26 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$
 - b) AmL²⁻ mit $\log K_{12} = 5,83 \pm 0,13$, $\Delta H_{12} = 19 \pm 5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\Delta S_{12} = 107 \pm 16 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$

Durchführung von Batch-Experimente (AP3) zur temperaturabhängigen Sorption von Eu(III) an Opalinuston (I = 0,42 M NaClO₄, pH = 7,6, 0- 4 g/l Ton, [Eu] = 5e-9 mol·l⁻¹, T = 25, 40, 55 °C) Erste Ergebnisse deuten auf eine geringfügige Verminderung (ca. 5-10 %) der Eu(III)-Sorption mit steigender Temperatur hin.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der temperaturabhängigen Batch-Sorptionsexperimente (mit Am(III) und Eu(III), pH = 7,6, I = 0,42 mol·l⁻¹, Medium: Porenwasser, NaClO₄, Anwesenheit eines organischen Liganden (AP3))
- Fortführung der mikrotitrationskalorimetrischen Untersuchungen an Eu(III)-Huminstoff-Modellligandsystemen (u. a. mit Weinsäure, Salicylsäure)
- Abschluss der Arbeiten zu thermodynamisch-spektroskopischen Untersuchungen der Komplexsysteme Eu(III)/Am(III) mit Weinsäure, Pyromellitsäure, Citronensäure und Salicylsäure: Prüfung der Daten auf Reproduzierbarkeit; TRLFS-Untersuchungen auch bei T < 25 °C.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zwei akzeptierte Posterbeiträge für "12th International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere 2009", 20.-25.09.2009, Kennewick, Washington, USA

Zuwendungsempfänger: TU Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 10427
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2007 bis 31.12.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 586.331,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Überlegungen innerhalb der Bundesregierung, neben Salzgestein auch Tongestein als mögliches Endlager-, Wirts- und Barrierengestein in Betracht zu ziehen und vergleichende Untersuchungen zu sicherheitlichen Vor- und Nachteilen zumindest auf generischer Ebene vorzunehmen, erfordern eine intensive wissenschaftliche Auseinandersetzung mit den endlagerrelevanten Eigenschaften der Tongesteine und ihrer Reaktion auf den technologischen Eingriff mit Auffahrungen, Abfallablagerung und Stilllegungsmaßnahmen. Vor diesem Hintergrund ist in dem Vorhaben 02E9632 vom Unterzeichnenden der Übertragbarkeit von etablierten Stoffmodellen aus dem Salinarbereich auf das Tongestein nachgegangen worden.

Angesichts der Tatsache, dass in Deutschland die Möglichkeiten zur aktiven Forschung im Tongestein sehr begrenzt sind, ist eine Beteiligung an internationalen Projekten im Tongestein unerlässlich zur Erarbeitung eigener Erfahrungen und eines eigenen Modellierungs- und Simulationsinstrumentariums. Eine Mitarbeit des Unterzeichnenden im Programm „Excavation Damaged Zone (EDZ) in the argillaceous Tournemire site“ im Rahmen eines auf hohem wissenschaftlichen Niveau laufenden Projektes schließt inhaltlich konsequent an das Forschungsvorhaben 02E9632 an, so dass die dort erzielten Forschungsergebnisse in internationaler Zusammenarbeit unmittelbar auf ein sehr gut dokumentiertes Feldprojekt im Tonsteingebirge am Standort Tournemire mit Daten zu geologischer Struktur, mechanischen und hydraulischen Eigenschaften, Deformationen und konturnahen Rissbildungen (zeitabhängige Entwicklung der EDZ) angewandt werden können.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Datenbeschaffung und Datenaufarbeitung,
- AP2: Bohrkernbeschaffungskampagne,
- AP3: Beobachtung des zeitabhängigen Bohrlochverhaltens durch Kalibermessungen,
- AP4: Aufarbeitung vorhandener laborativer Erkenntnisse,
- AP5: Durchführung eigener laborativer Untersuchungen,
- AP6: Ableitung von standortbezogenen repräsentativen Materialdaten,
- AP7: Aufbau von 3-dimensionalen Berechnungsmodellen,
- AP8: Durchführung numerischer Simulationen zum Gebirgstragverhalten,
- AP9: Gegenüberstellung von Berechnungsergebnissen und Messdaten,
- AP10: Diskussion der Ergebnisse im internationalen Rahmen,

AP11: Dokumentation der Forschungsarbeiten, Generalisierung der Befunde, Erarbeitung eines Abschlussberichtes.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Durchführung von Gesprächen zur erweiterten Datenbeschaffung.
- AP2/3: Erneute Kontaktaufnahme mit IRSN nach Personalwechsel; Planung einer zweiten Bohrkernbeschaffungs- und Messkampagne in Tournemire im Herbst 2009 in Absprache mit IRSN.
- AP5: Verwendung von eigens für die Resättigung von Prüfkörpern hergestellten und optimierten Zwischenlagerungsbehältern; Durchführung erster Kriechversuche (UCc) unter Befeuchtung der Umgebungsluft (\Rightarrow Bruch nach kurzer Zeit).
- AP8: Durchführung erster Berechnungen am 3D-Modell des Querstollens 2003 zur Simulation des von IRSN bei dessen Auffahrung durchgeführten „Mine-by-Tests“.
- AP9: Erste Gegenüberstellung von Ergebnissen aus der 3D-Simulation aus AP8 mit Arbeiten aus AP1.
- AP10: Vorstellung der bisherigen Ergebnisse bei IRSN im Rahmen der Planung weiterer Aktionen nach der erneuten Kontaktaufnahme; Verfassen und Einreichen einer Veröffentlichung (siehe unter 5.).
- AP11: Dokumentation der ersten Bohrkernbeschaffungskampagne, von Laborversuchen und Simulationen; Einarbeitung dieser Texte sowie der Stoffmodelle in Abschlussbericht.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2/3: Durchführung/Begleitung der zweiten Bohrkernbeschaffungskampagne sowie Durchführung von Wiederholungsmessungen und ersten Messungen in den Bohrlöchern der geplanten neuen Kernbohrungen im Herbst 2009 am Standort Tournemire in Absprache mit IRSN.
- AP5: Planung und Durchführung weiterer Versuche an Bohrkernmaterial der Lokation Tournemire zur Identifizierung der lagerungsbedingten Ausprägung der das mechanische Materialverhalten von Tongestein maßgeblich beeinflussenden hydraulischen Verhältnisse (Porenwasserdruck, Wassergehalt); Porendruckmessung während der Versuche.
- AP6: Ableitung von zeitabhängigen Materialkennwerten.
- AP8: Weiterführende Herausarbeitung grundsätzlicher numerischer Erfahrungen im Tonsteingebirge durch Stoffmodell-/Parametervariation an 3D-Referenzmodell aus AP7.
- AP9: Nach Ableitung zeitabhängiger Materialkennwerte (AP6) Gegenüberstellung der Ergebnisse weiterer Variationen aus AP8 mit Arbeiten aus AP1 (Mine-By-Test); Optimierung des Kriechbruchkriteriums und Untersuchung des Langzeittragverhaltens.
- AP10: Diskussion der Ergebnisse im internationalen Rahmen (Luxemburg, 29.09.2009).
- AP11: Fortführung der Dokumentation der Forschungsarbeiten, Generalisierung der Befunde, Weiterführung der Arbeiten zum Abschlussbericht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Lux, K.-H.; Rutenberg, M.; Czaikowski, O. (2009): Time-Dependent Deformation of Claystone Rock Mass – Numerical Simulation and Field Measurement Data. Tagungsbericht der TIMO-DAZ-Konferenz vom 29.09.-01.10.2009. In Vorbereitung.

Zuwendungsempfänger: Bauhaus-Universität Weimar, Geschwister-Scholl-Str. 8, 99423 Weimar		Förderkennzeichen: 02 E 10437
Vorhabensbezeichnung: Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2007 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 290.316,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Schanz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In Vorläuferprojekten hat der Antragsteller die unterschiedlichsten Eigenschaften von gesättigten und ungesättigten Tonen untersucht. Dazu gehörten die Kompressibilität, der Quelldruck, das Quellpotential und in jüngster Zeit den Einfluss der Temperatur auf das gekoppelte hydraulisch mechanische Verhalten von Tonen. Die im Vorfeld durchgeführte Auswertung der internationalen wissenschaftlichen Literatur zur Endlagersicherheitsforschung führt zu dem eindeutigen Ergebnis, dass im Bereich der hydraulischen Konduktivität von expansiven Tonen/Bentoniten ein erheblicher Erkenntnismangel besteht.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Ziel des vorliegenden Forschungsantrags ist die Ableitung eines konstitutiven Modells zur Beschreibung der gesättigten hydraulischen Konduktivität von expansiven Tonen (Bentoniten).

Die hierzu notwendigen Untersuchungen umfassen sowohl experimentelle als auch theoretische Arbeiten. Ausgehend von der mikrostrukturellen Betrachtung von moderat bis hochverdichteten Tonen als Materialien mit unterschiedlichen Porensystemen (multimodale Porengrößenverteilung) wird mittels physikalischer und physiko-chemischer Konzepte der für die hydraulische Konduktivität relevante Anteil der Porengrößenverteilung und dessen Evolution zufolge Hydratation quantifiziert. Das Modell beinhaltet neben den mineralogischen Eigenschaften der Tone (u. a. CEC, spezifische Oberfläche, etc.) auch die physiko-chemischen Eigenschaften der Porenfluide (u. a. Ionenkonzentration, etc.). Das Modell ist wegen dieser zu Grunde liegenden Zusammenhänge direkt auf natürliche Tone zu übertragen. Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen zur Validierung und Verifizierung des Modells werden an unterschiedlichen Bentoniten isochorische Quelldruckversuche mit anschließender gesättigter Durchströmung durchgeführt und ausgewertet. Anwendungen des Modells ergeben sich u. a. im Bereich der Verwahrung von radioaktiven und toxischen Abfällen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zurzeit werden die hydraulischen Permeabilitätsversuche an den expansiven Tonen durchgeführt. In einer ersten Versuchsphase werden die Versuchskörper quasi drucklos mit Fluid beaufschlagt und volumenkonstant gesättigt. Dabei werden die Fluidaufnahme und der Quelldruck über die Zeit erfasst. Die Proben sind quasi gesättigt ($> 98\%$) wenn der Quelldruck konstant und (!) die Fluidaufnahme = 0 sind. Es werden auch in Abhängigkeit von den Versuchsrandbedingungen nicht monotone Zeitverläufe der Quelldrücke beobachtet.

Der Quelldruck erreicht in Abhängigkeit vom initialen Zustand zunächst ein temporäres Gleichgewicht um nach einigen Tagen auf ein deutlich erhöhtes Niveau anzusteigen. An den gesättigten Proben werden dann die hydraulischen Permeabilitäten bestimmt. Zur Untersuchung der Abhängigkeit der Permeabilität vom hydraulischen Gradienten werden die einzelnen Versuchskörper nach Erreichen eines konstanten Volumenstroms je Laststufe mit anwachsenden Gradienten beaufschlagt. Diese hydraulischen Laststufen dauern zwischen drei bis vier Wochen. Es werden jeweils drei identische Versuchskörper identisch beaufschlagt. Die gemittelten Ergebnisse werden zur Validierung und Verifizierung des theoretischen Modells verwendet. Das theoretische Modell wird durch eine Inventur existierender Modelle vorbereitet. Deren Validierung erfolgt an Hand der bisher gemessenen Permeabilitäten. Die Erstellung eines numerischen Modells zur inversen Analyse der experimentellen Versuchsergebnisse ist abgeschlossen. Die theoretischen Modelle prognostizieren die Permeabilität für moderate Porenzahlen zufriedenstellend, für geringe Werte ist eine Modifizierung der theoretischen Modelle notwendig.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Ausweitung der experimentellen Untersuchungen zum Quelldruck und der hydraulischen Permeabilität von kompaktierten Bentoniten auf weitere Typen: MX80 (USA) und Kunigel (Japan). Charakterisierung dieser Tone.
- Berücksichtigung unterschiedlicher physico-chemischen Kräfte im theoretischen Modell
- Testberechnungen mit dem inversen Modell
- Vergleich & Bewertung der gemessenen und prognostizierten Volumenströme und Permeabilitäten.
- Erweiterung der Versuche auf nicht-expansive und natürliche Tone.
- Fortführung der Permeabilitätsversuche unter Variation der Fluide und Initialzustände.
- Untersuchung der Evolution der Porengrößenverteilung mit der hydraulischen Beanspruchung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 30.09.2009		Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009
Gesamtkosten des Vorhabens: 180.978,00 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 Querschnittsabdichtungen für untertägige Hohlräume.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Erstellung eines Lastenheftes

AP2: Entwicklung eines Konzeptes für die Versuchsausrüstung und die Versuchsdurchführung

AP3: Konstruktion, Planung und Bau der Versuchsausrüstung

AP4: Entwicklung Auswertesoftware

AP5: Test und Korrektur der Versuchsausrüstung

AP6: Berichtslegung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Softwareentwicklung:

- Fortsetzung der Entwicklung einer datenbankgestützten Eingabeoberfläche für die Aufbereitung der Messdaten und die numerische Auswertung mit dem Programmsystem ModOFP
- Programmtestung

Hardware Oberflächenpacker:

- Konzipierung eines zweiten Oberflächenpackers
- Testung von Dichtungsmaterial auf Gaspermeabilität und Nutzbarkeit als Flächendichtung

Hardware verlorener Drucksensor:

- Testung der Sendeleistung erfolgreich
- Testung der externen Steuerung der Datenübertragung
- Konzipierung Batterieleistung
- Abstimmung des Konzeptes der Kommunikation zwischen verlorenem Sensor, Auslese-einheit, Datenlogger (Schwerpunkt: Abstimmung des Zeittaktes aller erfassten Daten)
- Überarbeitung der Leiterplatte zur Vermeidung von Funkstörungen der internen Elektronik

Tests:

- Durchführung von laborativen Gaspermeabilitätsmessungen an Kernproben des Magnesia-binderblocks als Referenzparameter für die Beurteilung der Oberflächenpackermessungen
- Testung Oberflächenpacker für unterschiedliche Magnesiummchtigkeiten

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortsetzung des Projektes entsprechend Arbeitsprogramm (Abschnitt 2) mit den Arbeitspaketen 2 - 5.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: TU Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 10457
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2007 bis 31.03.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 652.391,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Konietzky	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Durch die Beschreibung des strukturellen Aufbaus von Baustoffen sollen modelltechnisch fundierte Rückschlüsse zu den Eigenschaften heterogen strukturierter Baustoffe abgeleitet werden. Exemplarisch werden die für Verschlussbauwerke relevanten Materialien MgO-Beton und Asphalt betrachtet. Die Beschreibung des Strukturmodells erfolgt durch die Bestimmung der Eigenschaften der Einzelkomponenten, der Kontakteigenschaften sowie der räumlichen Struktur. Das Gesamtverhalten des Systems wird durch Triaxialversuche mit Schädigungsdetektierung, Druck- und Zugversuche sowie Kriechversuche und Bruchzähigkeitsversuche festgestellt. Daraus werden entsprechende Stoffgesetze entwickelt, die mit den Strukturmodellen in Rechenprogramme einfließen. Die Ergebnisse ermöglichen die Beschreibung des Verformungs- und Bruchverhaltens von Beton (MgO-Beton) und von Asphalt. Dadurch ist eine wissenschaftlich fundierte Optimierung der Baustoffrezepturen und die Entwicklung maßgeschneiderter Baustoffe für langzeitstabile Verschlussbauwerke möglich. Für die Prognose des Langzeitverhaltens von Verschlussbauwerken werden neue Werkzeuge geschaffen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Beschreibung eines Strukturmodells für Asphalt
- AP2: Beschreibung eines Strukturmodells für Beton
- AP3: Umsetzung der Strukturmodelle in das Rechenprogramm (UDEC, PFC)
- AP4: Beschreibung und Steuerung des Langzeitverhaltes von Asphalt
- AP5: Beschreibung und Steuerung des Langzeitverhaltes von Beton
- AP6: Sensitivitätsuntersuchungen und Optimierungsrechnungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1, AP2: Das Cluster-Konzept im numerischen Modell wurde so ausgebaut, dass Zuschlagskörner als zusammenhängend gebundene Partikel-Cluster mit geringen inneren Anfangsspannungen erzeugt werden können (vgl. AP 3). Für Asphaltmastix wurde geklärt, dass bei der Kontaktmodellierung generell Kohäsionsversagen im Bindemittel angenommen werden kann.
- AP3: Arbeiten zur automatischen Generierung der Probengeometrie außerhalb PFC3D/3DEC:
 - Packungsmodellierung mittels starrer Kugeln für PFC3D:
Weiterentwicklung des Algorithmus zur Generierung von Partikel-Clustern mit Ziel möglichst realitätsnaher Modellierung des Zuschlags: Funktionen wurden hinzugefügt, die analog zum CPA-Verfahren die Längen- und Breitenverteilungen der Projektionen der synthetischen Zu-

schlagskörner liefern (basierend entweder auf den verwendeten Ellipsoidkonturen oder auf den Clustern selbst). Damit Vergleich der Verteilungskurven von realem und synthetischem Zuschlag möglich als Maßstab für die Näherungsqualität. Umsetzung der 2D-CPA-Informationen in die 3D-Cluster-Erzeugung wurde so weiterentwickelt, dass relativ gute Übereinstimmung dieser Verteilungskurven erreicht werden konnte. Modifikation des Algorithmus, dass später im PFC-Modell keine Cluster mit zu großer Anfangsspannung entstehen.

- Packungsmodellierung mittels Polyedern für 3DEC:

Programm GrainGen wurde um zusätzliche Optionen erweitert, insbesondere die Erzeugung von Polyederpackungen mit glatten Rändern (erleichtert Aufbringen von Randbedingungen) und die Erzeugung unterschiedlicher Packungen mit gleichen Abmessungen und Polyederanzahlen.

Das Paket von FISH-Routinen als einheitliches PFC-Simulationstool wurde um den direkten Zugversuch und den Bruchzähigkeitstest erweitert, vorbereitet wurden Druck- und Scherkrichversuche sowie die Simulation von Einzelkorndruckversuchen. Der Einbau von Kontaktgesetzen für Asphalt als nutzerdefiniertes Modell (UDM) wurde begonnen, für die Beton-Komponenten wurde eine Kalibrierungsstrategie entwickelt. Bei Simulation der Beton-Triaxialversuche konnte nicht die Krümmung der Hüllkurve wie bei den Laborversuchen erreicht werden, anscheinend ein prinzipielles Problem des linearen Kontaktmodells.

Die Modellierung der Zuschlagskörner als stark gebondete Cluster von PFC-Partikeln wurde implementiert (eigenständige Cluster-Datenstruktur, Aufbau und Verwaltung, umfangreiche Analyse-Routinen).

- AP4: Einaxiale Druckkriechversuche an Asphalt wurden durchgeführt und weitestgehend ausgewertet (drei Versuche mit jeweiliger Versuchszeit von einem Monat unter konstanten Klimabedingungen), die Hälfte der geplanten Druckversuche an Asphalt wurde realisiert und ausgewertet (jeweils drei Versuche bei vier verschiedenen Deformationsgeschwindigkeiten unter konstanten Klimabedingungen).
- AP5: Beton-Versuchsprogramm weitgehend abgeschlossen: Dauerlastversuche mit Bindemittel und MgO-Beton beendet, Bruchzähigkeitstest für Bindemittel und MgO-Beton am selbst geschaffenen Messplatz realisiert (Messanleitung verfasst), Versuche ausgewertet.
- AP6: Simulationsprogramm vorbereitet für Kopplung mit Sensitivitäts- und Optimierungstool, erste Version des Parameterraumes für Sensitivitätsanalyse festgelegt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Im Wesentlichen abgeschlossen.

AP2: Im Wesentlichen abgeschlossen.

AP3: Weiterführung Stoffgesetzenentwicklung für Asphalt als nutzerdefiniertes Modell (UDM), Simulationen: Kriechversuche für Asphalt sowie Druckversuch Einzelkorn für Zuschlag, Kalibrierung für Beton, Bitumen und Asphalt.

AP4: Weiterführung und Auswertung der restlichen Druckversuche an Asphalt, weiterer Kriechversuch zur Verbesserung der Datenlage.

AP5: Im Wesentlichen abgeschlossen.

AP6: Kopplung von optiSLang (DYNARDO) mit Simulationsprogramm über ASCII-Files, Sensitivitätsanalysen Makro- bezüglich Mikroparameter, ggf. Optimierung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec) GmbH, Forschungsge- lände, 85748 Garching b. München		Förderkennzeichen: 02 E 10467
Vorhabensbezeichnung: Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2007 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 407.850,00 EUR	Projektleiter: Dr. Alkan	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den vorgeschlagenen Arbeiten soll die gekoppelte Modellierung von hydraulischen, mechanischen, thermischen und chemischen Prozessen für die Beschreibung des reaktiven Stofftransports bei der Endlagerung in Salz- und Tonformationen vorangebracht werden. Für die numerische Umsetzung dieser Modellierung soll der Code TOUGHREACT verwendet werden, da positive Erfahrungen für derartige Anwendungen vorliegen. Der Code soll zu diesem Zweck angepasst, weiter entwickelt und qualifiziert werden. Die Ergebnisse sollen einen Vergleich der beiden Endlagerwirtsgesteine ermöglichen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Erweiterung der thermodynamischen Datenbasis

Die thermodynamische Datenbasis des Codes TOUGHREACT wird, basierend auf der bekannten chemischen EQ3/6 Datenbank, erweitert, qualitätsgesichert und komplettiert. Hier-von betroffen sind insbesondere die Gleichgewichts- und Kinetikkonstanten sowie die Pitzer-Koeffizienten der primären und sekundären Komponenten aller Phasen.

AP2: Numerische Implementation

Für eine korrekte Umsetzung des Codes TOUGHREACT in die gezielten Arbeitspunkte wer-den numerische Weiterentwicklungen und Implementationen geplant. Für diesen Arbeits-punkt werden folgende Arbeiten durchgeführt:

Das vorliegende Pitzer Aktivitätsmodell für die thermodynamische Modellierung hochsalina-
rer gesättigter Lösungen wird aktiviert, getestet und validiert.

Die mechanische Konvergenz und Quellung des Bentonits werden an das existierende Modell gekoppelt.

Das ECO2N Zustandsgleichungsmodul des TOUGHREACT wird weiter für eine bessere Modellierung der CO₂- und CH₄-haltigen Laugensysteme entwickelt, getestet und validiert.

In TOUGHREACT implementierten Porositäts- und Permeabilitätsbeziehungen und Kluft-breite-Permeabilitätsmodelle sowie Zweiphasenfluss-Parameter werden, wie relative Permea-bilität und Kapillardruck, auf ihre Funktionalität getestet.

AP3: Validierung mit Labordaten

Die Validierung der oben beschriebenen Modifikationen in TOUGHREACT wird anhand der experimentellen Daten durchgeführt, die eventuellen Abweichungen werden analysiert und überarbeitet.

AP4: Anwendung

Ziel dieses Projektteils ist die Demonstration der Anwendbarkeit der modifizierten TOUGHREACT-Version für realitätsnahe Sicherheitsanalysen von Endlagersystemen anhand eines repräsentativen Modells. Dieses Projektteil wird für Salzgestein und Tonformationen getrennt durchgeführt.

AP5: Dokumentation

Die durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse werden schriftlich dokumentiert.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Folgende Arbeiten wurden nach Arbeitsplan durchgeführt:

Die Phasen und physikalischen Eigenschaften für CO₂-H₂O Mischungen wurden mit der letzten Version des Pakets ECO2N abgeglichen. Die Löslichkeit im Wasser mit unterschiedlicher Salinität und anderen physikalischen Eigenschaften der zusätzlich modellierten Gase CH₄ und H₂ wurden im Hinblick auf die Pitzer Implementation weiter untersucht, getestet und bearbeitet (AP2.3). Die Verfahren die in TOUGHREACT für die Berechnung der Änderungen in der Porosität und der Permeabilität infolge von Mineralauflösung und/oder Ausfällung vorgesehen sind, wurden eingearbeitet und mit den Experimenten verglichen. Das Modell von Verma and Pruess (1988) wies bessere Ergebnisse beim Modellieren der Porosität-Permeabilität-Beziehungen für Salzgestein und kompaktierten Salzgrus auf. Für Tongestein auf der anderen Seite ist die Modellierungsqualität für alle implementierten Modelle nicht ausreichend gut. Als Alternative wurde eine modifizierte Form der Kozeny-Carman Gleichung im Code implementiert. Diese Formulierung ergab bessere Ergebnisse mit der Berücksichtigung der Änderungen in der Kornoberfläche infolge von Mineralauflösung und/oder Ausfällung (AP2.4). Validierungsarbeiten am ISTec-Pitzer-Modul wurden für komplexe statische und dynamische Mehr-Komponenten-Systeme aus der Literatur fortgeführt. Mit den durchgeführten Arbeiten wurde das gesamte AP2 zu 100 % komplettiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Für weitere Validierungsarbeiten des ISTec-Pitzer Moduls und für den Vergleich und mögliche Weiterentwicklung des Codes wird im Rahmen des Projektes ein Forschungsaufenthalt in Berkeley, LBNL, Kalifornien geplant.

Mit der finanziellen Unterstützung der Alexander von Humboldt Stiftung im Rahmen eines Feodor Lynen Forschungsstipendiums werden bisherige ISTec-TOUGHREACT Arbeiten mit den Entwicklern der TOUGH diskutiert und AP3 wird endgültig abgeschlossen. Die Projektarbeiten werden danach mit Arbeitspaket AP4 -Anwendung- fortgeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Die Projektergebnisse werden bei Internationalen Tagungen (TOUGH2 Meeting, 14.-16. September 2009, Berkeley und THMC Konferenz, 29.-30. September 2009) vorgestellt.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10477	
Vorhabensbezeichnung: Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2007 bis 31.03.2009		Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 31.03.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 153.625,00 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, und welche experimentellen Daten für verbesserte Systemanalysen bereit zu stellen sind. Ziel ist, die relevanten Prozesse bei der Konsolidierung von Salzversatz zu ermitteln und ein Arbeitsprogramm für die erforderliche Weiterentwicklung von THMC-Modellen für die Langzeitsicherheitsanalyse von HAW-Endlagern bereitzustellen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Bestandsaufnahme aller national und international verfügbaren Daten
- AP2: Orientierende THMC-Simulationen der im Nahfeld vorherrschenden gekoppelten Prozesse
- AP3: Auslegungsplanung für ergänzende Laborexperimente bei geringen Porositäten
- AP4: Auslegungsplanung für ein In-situ-Experiment zum Nachweis der langfristig erreichbaren Restporosität und -permeabilität
- AP5: Auswertung und Berichtserstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Arbeiten zu AP2 wurden fortgesetzt. Nach erfolgreichem Abschluss der thermischen, der mechanischen und der thermo-mechanischen Modellrechnungen im letzten Berichtszeitraum wurde mit einer gekoppelten thermo-hydraulisch-mechanischen Rechnung begonnen. Dabei führten numerische Schwierigkeiten nach etwa 100 Zeitschritten und 3,6 Jahren Modellzeit zum Abbruch. Die Ursache für den Abbruch konnte aus Zeitgründen nicht ermittelt werden, da für diese Rechnungen eine neue Version von CODE_BRIGHT erforderlich war, die noch während des letzten Berichtszeitraums bestellt worden war, aber erst mit fast dreimonatiger Verzögerung geliefert worden war. Vergleichsrechnungen mit rein hydraulischen Modellen deuten aber darauf hin, dass das Problem mit der thermisch-hydraulischen Kopplung zusammenhängt.

Während des Berichtszeitraums fand ein Treffen mit den Mitgliedern des Verbundprojektes statt, das der gegenseitigen Darstellung des aktuellen Arbeitsstandes und der Planung des Abschlussberichts (AP5) diente. Eine erste Fassung des Abschlussberichts wurde fristgerecht zum Projektende übergeben.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10487
Vorhabensbezeichnung: Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2007 bis 31.03.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 31.03.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 149.212,00 EUR	Projektleiter: Herklotz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Referenzkonzept für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (HAW) in geologischen Steinsalzformationen sieht die Endlagerung verglasteter HAW-Kokillen aus der Wiederaufbereitung in tiefen vertikalen Bohrlöchern vor. In jüngerer Zeit wird auch die direkte Endlagerung von Brennelementen in ca. 5 m langen Brennstabkokillen in tiefen vertikalen Bohrlöchern diskutiert. Diese Einlagerungsbohrlöcher sollen im Hinblick auf den langfristig vollständigen Einschluss der Abfälle im Wirtsgestein mit artgleichem Salzgrusversatz verfüllt werden.

Auf der Grundlage der vorliegenden Kenntnisse und aktuell zur Verfügung stehenden Modelle und Codes soll die Signifikanz einzelner Prozesse im Nahbereich eines HAW-Endlagers im Hinblick auf den vollständigen Einschluss der radioaktiven Abfälle im Wirtsgestein und damit der Langzeitsicherheit des Endlagers (auf der Grundlage der im Projekt ISIBEL aktuell erarbeiteten Ausgangsbasis) weiterführend überprüft werden. Theoretische Stoffansätze für trockenen Salzgrus wurden im Rahmen des BAMBUS-Projektes entwickelt und für Porositätsbereiche zwischen 10 % und 35 % kalibriert. Aufbauend auf bisher vorliegenden Labor- und In-situ-Messergebnissen (TSS, DEBORA) ist es Ziel dieses Vorhabens, ein besseres Verständnis der komplexen Prozesse im Salzgrusversatz zu erlangen und eine belastbare Stoffgesetzanpassung im Bereich sehr geringer (Rest-)Porositäten unter In-situ-Randbedingungen zu erstellen.

Dieses komplexe Thema wird gemeinsam bearbeitet als Verbundprojekt von BGR, GRS und DBE Technology.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das nachfolgende Arbeitsprogramm ist zur Erreichung der Vorhabensziele geplant.

AP1: *Bestandaufnahme aller national und international verfügbarer Daten*
(Bearbeiter: BGR, DBE TEC, GRS)

AP2: Orientierende THMC-Simulationen der im Nahfeld vorherrschenden gekoppelten Prozesse (Bearbeiter: GRS)

AP3: Auslegungsplanung für ergänzende Laborexperimente bei geringen Porositäten (Bearbeiter: BGR)

- AP4: Auslegungsplanung für ein (ggf. zeit-skaliertes) In-situ-Experiment zum Nachweis der langfristig erreichbaren Restporosität und -permeabilität*
(Bearbeiter: BGR, DBE TEC, GRS)
- AP5: Auswertung und Berichterstellung*
(Bearbeiter: BGR, DBE TEC, GRS)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Arbeiten zu diesem Arbeitspaket sind abgeschlossen.
- AP4: Die Arbeiten zu diesem Arbeitspaket sind abgeschlossen.
- AP5: Planmäßig wurden in diesem AP innerhalb des Berichtszeitraumes die Ergebnisse der einzelnen Arbeitspakete zusammengestellt und in einem gemeinsamen Projektbericht der beteiligten Institutionen (GRS, BGR und DBE TECHNOLOGY) dem Projektträger fristgerecht übermittelt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Ergebnisse des Forschungsprojektes REPOPERM Phase I haben deutlich gemacht, dass der Kenntnisstand bezüglich des thermo-hydro-mechanischen Verhaltens von Salzgrus-Schüttversatz bei der Einlagerung von wärmeentwickelnden Abfällen nicht ausreichend abgesichert ist.

Gemeinsam mit den beteiligten Projektpartnern wird eine Projektskizze sowie eine Vorhabensbeschreibung für eine weiter führende Projektphase REPOPERM 2 erarbeitet, welche dem Projektträger zeitnah vorgelegt wird.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Abschlussbericht: „Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager – Phase 1“

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10498
Vorhabensbezeichnung: Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz (Vorprojekt) – Kurztitel: VIRTUS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2008 bis 30.04.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.04.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 177.970,00 EUR	Projektleiter: Dr. Herbert	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Um sicherzustellen, dass die nationalen Kompetenzen zur Errichtung eines Endlagers für hochradioaktive Abfälle dem internationalen Stand von Wissenschaft und Technik entsprechen und somit zur Entwicklung eines belastbaren Sicherheitsnachweises für die Salzoption beitragen, ist es erforderlich, das in 30 Jahren Untertageforschung im Steinsalz sowie das im Rahmen der internationalen Kooperationen erworbene Wissen zu erhalten. Dafür sollen die bisher in der Untertageforschung zur Salzoption erzielten Ergebnisse in einer zusammenfassenden Dokumentation zusammengetragen werden. Diese soll die Basis eines **Virtuellen Deutschen Untertagelabors im Steinsalz (VIRTUS)** bilden, das sowohl die numerische Simulation eines Untertagelabors gestattet, als auch über eine Visualisierung der Ergebnisse der Simulationen zu einer Verbesserung des Verständnisses der ablaufenden Prozesse beim forschenden Wissenschaftler und bei der interessierten Öffentlichkeit führt.

Das vorliegende Vorhaben ist ein Verbundprojekt der Partner GRS und BGR. Es stellt ein Vorprojekt dar, in welchem die Realisierbarkeit der gesteckten Ziele geprüft werden und das Hauptprojekt vorbereitet werden soll.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Dokumentation

AP1.1: Vorbereitung der Dokumentation zur Untertageforschung im Steinsalz

AP1.2: Entwurf einer geeigneten Datenbankstruktur

AP2: Definition des virtuellen Untertagelabors

AP2.1: Festlegung eines generischen geologischen Aufbaus (nur BGR)

AP2.2: Festlegung der URL-Auslegung

AP2.3: Festlegung von Experimenten und von Modell- bzw. Modellierungsdetails

AP2.4: Vorbereitung der Software-Entwicklung

AP3: Entwicklung des Arbeitsprogramms für das Hauptprojekt

AP4: Vorbereitung und nationale Abstimmung der Beteiligung an einem europäischen URL-Netzwerk

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die in AP1 und AP2 vorgesehenen Arbeiten wurden alle plangemäß erledigt und abgeschlossen.

Die im AP3 vorgesehenen Arbeiten zur Entwicklung des Arbeitsprogramms für das Hauptprojekt konnte im Rahmen des Vorprojektes nicht im vorgesehenen Umfang abgeschlossen werden, da sich ein erhöhter Diskussionsbedarf insbesondere zu den Schnittstellen zwischen den vorhanden Processlevel Codes und der zu entwickelnden Visualisierungssoftware ergab.

Bezüglich AP4 sind bisher noch keine konkreten Aktivitäten initiiert worden, da das erwartete EU-weite URL-Networking bisher noch nicht wieder von der KEG aufgegriffen wurde.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die noch offenen Punkte der Planungsarbeiten für das Hauptprojekt werden weiter geführt. Die Ergebnisse sollen dem Projektträger und dem BMWi noch im Sommer 2009 zur Entscheidungsfindung für das weitere Vorgehen vorgestellt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Herbert, H.-J., Moog, H., Rotfuchs, T., Wieczorek, K. und Xie, M. (2009): Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz (VIRTUS). – GRS-Abschlussbericht zum Vorhaben 02 E 10498, GRS-A-3469, 112 S., Braunschweig.

Eichhorn, P., Fleig, S., Hammer, J., Heemann, U., Heusermann, S., Mingerzahn, G., (2009): Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz (VIRTUS). – BGR, unveröffentl. Ber., Tgb. Nr. 10509/09, 52 S., Hannover.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10508
Vorhabensbezeichnung: Machbarkeitsstudie zur Vorbereitung eines 2-Bohrloch-Erhitzerversuches im URL Mont Terri, Schweiz „MACH-2“		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2008 bis 30.04.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.04.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 111.291,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen von Auslegungsberechnungen zur Planung eines Endlagers in einer Tonformation in Deutschland wurde ein Einlagerungs- und Barrierenkonzept entwickelt, das es ermöglicht, auch stark wärmeentwickelnde Abfälle mit brauchbaren Zwischenlagerzeiten in Tonformationen einzulagern. Das Konzept beruht auf der Einlagerung wärmeentwickelnder Abfälle in vertikalen Bohrlöchern, die je nach Behälterttyp einen definierten Abstand zueinander haben. Dieses Konzept soll in-situ unter repräsentativen thermischen Bedingungen getestet und die Plausibilität der bisherigen Auslegungsberechnungen überprüft werden.

Ziel dieses Vorhabens ist es, die Machbarkeit eines 2-Bohrloch-Erhitzerversuches im Maßstab 1:1 hinsichtlich technisch-wissenschaftlicher Aspekte im Mont Terri URL zu untersuchen. Dabei soll aufgezeigt werden, unter welchen Bedingungen die Realisierung eines solchen Demonstrationsversuches zur Einlagerung in vertikalen Bohrlöchern machbar ist. Eine detaillierte Versuchsplanung, ein Mess- und Instrumentierungskonzept und eine Zeit- und Kostenschätzung auf Basis konkreter Angebote ausgewählter externer Firmen sollen die Grundlage für die Bewertung der Durchführbarkeit des Versuches bilden.

Der geplante In-situ-Versuch könnte im Mont Terri URL durchgeführt werden. Im Laufe des Jahres 2008 wurde dort ein neuer Versuchsstollen inklusive einiger Experimentiernischen aufgeföhren. Das derzeitige Versuchskonzept sieht vor, zwei vertikale Einlagerungsbohrlöcher mit zwei Dummykokillen (elektr. Erhitzer) zu bestücken und mit einem definierten Buffermaterial zu versiegeln. Der Versuch soll mit ausreichend Sensorik bestückt werden, um die gegenseitige THM-Wechselwirkung beider Einlagerungsbohrlöcher in der geotechnischen Barriere und im Wirtsgestein zu beobachten und durch begleitende numerische Berechnungen zu analysieren.

Diese Studie wird in Kooperation mit der GRS Braunschweig durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Designberechnungen

AP2: Instrumentierungskonzept

AP3: Planungsunterlagen und Berichtserstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

Auf Basis der im AP1 durchgeführten Designberechnungen wurde das Mess- und Instrumentierungskonzept in Zusammenarbeit mit dem Projektpartner GRS weiter entwickelt bzw. verfeinert. Da die Temperaturentwicklung die treibende Kraft für die ablaufenden THM-Prozesse ist, wurde ein Raster von Beobachtungsbohrungen erstellt, mit dem sich die dreidimensionale Temperaturentwicklung in der Umgebung der Erhitzer in ausreichendem Maße verfolgen lässt. Damit soll es möglich werden, die aufgrund der Schichtung anisotrope Wärmeausbreitung messtechnisch zu erfassen, zu visualisieren und modellhaft zu analysieren. Durch eine dichte Instrumentierung soll der Einfluss lokaler Heterogenitäten identifiziert und korrigiert werden im Sinne einer detaillierten Parameteridentifizierung und Stoffgesetzanpassung.

Ergänzend sind sowohl mechanische Verschiebungsmessungen in unterschiedlicher geometrischer Orientierung als auch Messungen des Porenwasserdruckes in mehreren Beobachtungsbohrungen vorgesehen. In Zusammenarbeit mit der BGR-Hannover wurde darüber hinaus ein Messkonzept entwickelt, wie man mittels mikro-seismischer Messungen die zeitliche Entwicklung der Auflockerungszone des offenen Bohrloches als Folge der zunehmenden Erwärmung beobachten und ggf. quantifizieren kann.

AP3:

Basierend auf dem so erstellten detaillierten Messkonzept wurden Fachgespräche mit einschlägigen und entsprechend erfahrenen Fachfirmen durchgeführt und qualifizierte Angebote eingeholt, um sowohl die beiden Erhitzerbohrungen mit elektrischen Erhitzern auszurüsten als auch die Beobachtungsbohrungen mit geotechnischen Mess-Systemen geeignet auszurüsten und über mehrere Jahre wartungstechnisch zu betreuen.

Sämtliche Arbeiten und Ergebnisse wurden im Rahmen eines Abschlussberichtes dokumentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

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 30.09.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 886.153,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt ESTRAL (Partner: Forschungszentrum 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 Arbeitsgesprächen mit FZD in Braunschweig und Leipzig.
 - Festlegung der zu betrachtenden Elemente und Zusammenstellung ausgewählter Mineralphasen für die Sorptionsversuche. Basierend auf umfangreichen Literaturrecherchen und identifizierten Datenlücken wurden 12 Systeme aus Mineralphase und Sorbat festgelegt, für die die Sorption in Batchexperimenten untersucht wird.
 - Ein Untersuchungsprogramm für die Vorversuche zu den Sorptionsexperimenten wurde erstellt.
- AP2: - Identifizierung relevanter, das chemische Milieu beeinflussender Prozesse anhand von 1D-Modellrechnungen mit PHREEQC für eine Meerwasserintrusion unter Berücksichtigung von Lösungs-/Fällungs-Gleichgewichten und Ionenaustauschreaktionen. Erstellung der thermodynamischen Datenbasis auf Grundlage der Datenbanken der NAGRA und der ANDRA.
 - Identifizierung erster Anforderungen an die Erweiterung der Strömungs- und Transportprogramme d^3f und r^3t . Diskussion der Relevanz der einzelnen geochemischen Prozesse und ihrer möglichen Umsetzung im Programm r^3t .
 - Auswahl eines von USGS beschriebenen Säulenversuchs zum U(VI)-Transport zur Überprüfung des weiterentwickelten Rechenprogramms r^3t . Planung zur Durchführung des Säulenversuchs an der TUBS (Prof. Durner) im Rahmen einer Qualifikationsarbeit. Ein erstes Treffen ist im Juli 2009 geplant.
- AP3: - Festlegung von Rahmenbedingungen für die beiden Klimaübergänge (Transgression und Auftauen von Permafrost) und Vorbereitung der Strömungsrechnungen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: - Abschließende Literatur- und Datenbankrecherche für die endgültige Festlegung der zu betrachtenden Sorbat-Systeme.
 - Fertigstellung des Laborprogramms und Beginn der Sorptionsexperimente.
- AP2: - Festlegung des Konzepts zur Berücksichtigung aller geochemischen Prozesse in r^3t und Abstimmung mit dem/n beteiligten Entwickler/n des Steinbeis-Institutes zur Umsetzung in r^3t .
 - Planung und Durchführung des Säulenversuchs an der TUBS.
- AP3: - Fertigstellung der Modelle für die Strömungsrechnungen.
- AP4: - Einrichtung eines gemeinsamen Fileservers am FZD.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum 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 30.09.2011	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
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:

- Auswahl von Mineralphasen und Radionukliden (redoxspezifisch), dabei Berücksichtigung mineralogisch ähnlicher Phasen und chemischer Analoga für die Sorbentien zur Verbreiterung der Datenbasis
- Zusammenstellung der thermodynamischen Datenbasis für die Lösungs- und Feststoffchemie, im wesentlichen auf Nagra/PSI und ANDRA basierend
- Erfassung der SCM-Parameter für die ausgewählten Mineral/Sorbens-Paare inklusive Update der RES³T-Datenbank
- Einarbeitung in PHREEQC mit Testrechnungen

AP2:

- Zusammenstellung von Literatur zu numerischen Algorithmen für mehrdimensionales Daten-Lookup

AP4:

- Dokumentation der Auswahl standortspezifischer und thermodynamischer Einflussgrößen

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Komplettierung der Einflussgrößen sowie der SCM-Parameter einschließlich deren Bandbreiten
- Einarbeitung in die Software UCODE und Koppelung mit PHREEQC zur automatisierten Erzeugung mehrdimensionaler K_d -Matrizen
- Beginn der Erzeugung der K_d -Matrizen

AP2:

- Konzeptionelles Modell zur Variation der chemischen Stoffgrößen im r³t-Code
- Konzept zur Bearbeitung und Speicherung mehrdimensionaler, nicht-äquidistanter Tabellen

AP4:

- Einrichtung eines gemeinsamen Fileservers am FZD
- Dokumentation der Auswahl der SCM-Parameter

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 31.12.2010		Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
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 Fe²⁺ 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 °, 80 ° und 120 °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

AP1 und AP3: Im Berichtszeitraum wurden Versuche an kompaktierten MX80-Proben mit Opalinustonwasser (OPW) und mit NaCl-Lösung (NaCl) mit und ohne Zusatz von Fe^{2+} durchgeführt. Fe^{2+} wurde in den Konzentrationen 10^{-1} , 10^{-2} , 10^{-3} und 10^{-4} mol $\text{FeCl}_2/1000$ g Lösung zugesetzt. Gemessen wurden jeweils der Quelldruck und die Permeabilität. Diese Messungen wurden in AP1 bei 25 °C und in AP3 bei 60 ° und 90 °C durchgeführt. Die Ergebnisse der bisherigen Messungen lassen sich wie folgt zusammenfassen:

Die Quelldrucke des Bentonits mit OPW sind praktisch doppelt so hoch wie mit NaCl. Durch Zusatz von FeCl_2 ändern sich die Quelldrucke nicht signifikant, ein Trend zu leicht niedrigeren Quelldrucken bei Zugabe von FeCl_2 scheint sich jedoch abzuzeichnen. Mit steigenden Temperaturen gibt es keine einheitlichen Trends der Quelldruckentwicklung. Bei OPW ohne FeCl_2 scheinen die Quelldrucke mit der Temperatur leicht zu steigen, während sie bei Zugabe von FeCl_2 eher etwas abfallen.

Die bisherigen Versuche bestätigen also frühere Ergebnisse, wonach die Quelldrucke von Bentonit mit den betrachteten Lösungen insgesamt niedrig sind, und mit steigendem Salzgehalt der Lösungen noch weiter abfallen. Neu sind die Permeabilitätsmessungen. Die Permeabilitäten liegen beim niedrigsalinaren Opalinustonwasser im Bereich von 10^{-20} m^2 und bei gesättigter NaCl-Lösung mit ca. 10^{-16} m^2 um vier Größenordnungen höher. Wenn diesen Lösungen Fe^{2+} zugefügt wird, kommt es zu einer teilweisen Oxidation des zweiwertigen Eisens zu dreiwertigem Eisen und damit zu einer geringfügigen aber messbaren Volumenvergrößerung, die in verringerter Permeabilität zum Ausdruck kommt. Bei höheren Temperaturen zeigt sich ein Trend zu etwas erhöhten Permeabilitäten.

AP2: Mit den Untersuchungen zur Änderung der Diffusionskonstanten der FeCl_2 -Lösungen in kompaktierten MX80-Proben wurde begonnen. Die Diffusionszellen wurden konzipiert und beschafft. Erste Messungen laufen, Ergebnisse liegen jedoch noch nicht vor.

AP4: Mit den Arbeiten wurde begonnen, Ergebnisse liegen noch nicht vor.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterführung der Arbeiten zu AP1 bis AP3.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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: 01.01.2009 bis 30.06.2009
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.863.973,00 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:

- Erstellung von Teilkapiteln zu den Themen „Indikatoren“ und „Behandlung von Unsicherheiten“ und Abstimmung innerhalb der Arbeitsgruppen im Rahmen der IGSC-Initiative Methods for Safety Assessment (MeSA). Teilnahme am 1. Arbeitstreffen in Paris.
- Teilnahme an der jährlichen Sitzung des RWMC.

- Prüfung und Korrektur weiterer Beiträge zum Leitfaden für die Erstellung von Oberflächenkomplexmodellen zum NEA-Sorptionsprojekt III.
- Teilnahme an der Sitzung des Arbeitskreises Szenarientwicklung.
- Durchführung von zwei Arbeitsgesprächen mit GNS. Festlegung von relevanten Radionukliden und Zusammenstellung aller vorhandenen Informationen zu Radionuklidinventaren für HAW-, CSDC- und CSDB-Kokillen.

TA2:

- Erarbeitung eines Konzepts zur Berücksichtigung von Klimazuständen und -übergängen in Biosphärenmodellen zusammen mit der GSF-Neuherberg. Festlegung eines Zeitplans.
- Erstellung von konzeptuellen Modellen zur Berücksichtigung von Klimaübergängen in Strömungsrechnungen. Implementierung einer zeitabhängigen Permeabilität in d³f.
- Durchführung einer Bohrkampagne am Standort Ruprechtov mit Abteufen von zwei Bohrungen. Identifizierung der Uran-reichen Horizonte mittels γ -Spektroskopie und Verteilung von Probenmaterial an die beteiligten Institutionen. Erste Versuche zur U(IV)/U(VI)-Trennung an ausgewählten, möglichst ungestörten Proben im Gelände.
- Fertigstellung der Messzellen und Beginn der Bentonit-Aufsättigungsversuche. Analyse der Mikrostruktur der Bentonit-Sandgemische anhand der abgeleiteten Zusammenhänge und charakteristischen Größen. Überprüfung der im Code VIPER implementierten Gleichungen, zur Verbesserung der Modellergebnisse des Benchmark THM 2.
- 1. Teilnahme am Workshop der Task Force EBS am 25./26. Mai in Rosersberg, Schweden.

4. Geplante Weiterarbeiten

TA1:

- Teilnahme an der jährlichen Sitzung der IGSC.
- MeSA-Arbeitsgruppe: Überarbeitung der Textentwürfe für die vier Teilkapitel und abschließender Review aller Beiträge. Diskussion des Statusberichts zu Phase I und Identifizierung zukünftiger Arbeiten für Phase II auf dem nächsten Arbeitstreffen in München.
- Ermittlung von aktualisierten Radionuklidinventaren für HAW-Kokillen auf Basis der vorhandenen Datensätze.
- Erweiterung der Rechenmodule von EMOS und Durchführung erster Modellrechnungen für Endlager in Salz und Tonformationen zur Überprüfung der Sinnfälligkeit der von GRS Köln vorgeschlagenen neuen Indikatoren.

TA2:

- Durchführung erster Modellrechnungen der GSF für Biosphären unter veränderten klimatischen Bedingungen und Diskussion der Ergebnisse auf dem nächsten Arbeitstreffen.
- Implementierung der Übergabe von transienten Strömungsfeldern von d³f an r³t. Durchführung von Strömungsrechnungen für ausgewählte Klimaübergänge.
- Durchführung der ersten Grundwasserprobenahme-Kampagne an den neuen Entnahmestellen in Ruprechtov und Beginn der begleitenden Laborexperimente.
- Erstellung eines Statusberichts zum aktuellen Stand des Rechencodes VIPER und der Modellrechnungen zur Task Force EBS. Weiterführung der Aufsättigungsexperimente und Teilnahme am nächsten Workshop der Task Force EBS.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.074.250,00 EUR	Projektleiter: Dr. Fein	

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

Es ist die Aufgabe der Projektleitung mit den Mitgliedern des Verbundprojektes einen Kooperationsvertrag, der das Zusammenarbeiten regelt, abzuschließen. Dieser Vertrag ist formuliert, abgestimmt und befindet sich zurzeit zur Unterschrift bei den Verwaltungen der Universitäten bzw. des Helmholtz-Zentrums für Umweltforschung.

Am 27. Februar 2009 fand in Leipzig das 1. Statusgespräch bei Prof. Attinger und Prof. Kolditz statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über die bereits erfolgten und die für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten. Das nächste Statusgespräch wird am 20. Oktober 2009 im Anschluss an das 6. Projektgespräch zu E-DuR in Frankfurt in der Villa Giersch der Uni Frankfurt bei Prof. Gabriel Wittum stattfinden.

Es wurde vereinbart, im Zeitraum bis Oktober geeignete Testfälle zu identifizieren. In Betracht kommen dabei Ergebnisse der NAGRA aus dem EFP-Projekt. Für eine Einzelkluft existiert bereits ein Rockflow-Modell, das als ein erster, einfacher Testfall adaptiert werden könnte. Eine weitere Möglichkeit stellt die Verwendung von Daten der SKB aus der „Task force on modelling of groundwater flow and transport of solutes“ dar.

Für den Internetauftritt des Verbundprojektes würde die Domain www.a-dur.org reserviert. In Zusammenarbeit mit SfR wurde eine Homepage erstellt, die voraussichtlich im August 2009 der Öffentlichkeit zugänglich gemacht wird. Sie enthält unter anderem eine Vorstellung des Forschungsprojekts, des Konzepts und der Ziele. Außerdem ist ein passwortgeschützter FTP-Server für den Datenaustausch zwischen den Projektteilnehmern integriert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

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: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
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 Mehrskalensolvers 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 unsteitigen 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.

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:

Für den Dimensionsübergang im Mehrgitterverfahren hatten wir uns entschieden, die Kluft bereits äquidimensional im Grobgitter zu repräsentieren. Anhand des Quotienten des Seitenverhältnisses wird bei einem Element festgestellt, ob es niederdimensional oder äquidimensional behandelt wird. Wird ein Kluftelement als niederdimensional betrachtet, wird es auf einer virtuellen niederdimensionalen Zwischenschicht diskretisiert. Außerdem wird es speziell anisotrop verfeinert, um sein Seitenverhältnis zu verbessern. Dadurch wird gewährleistet, dass ab einer gewissen Gitterfeinheit nur noch volldimensionale Elemente vorhanden sind.

Wir haben bereits mit der Implementierung dieses adaptiven Übergangs von niederdimensionaler zu äquidimensionaler Modellierung der Klüfte in unserem Simulationswerkzeug UG begonnen. Die Verfeinerungsalgorithmen für den 2-dimensionalen Fall sind eingebunden und auch in d^3f zur Verfügung gestellt. Aktuell beschäftigen wir uns mit der Implementierung der Diskretisierung in d^3f , wobei die Diskretisierung für die niederdimensionalen Elemente bereits eingebunden wurde. Wir arbeiten momentan an einem adaptiven Übergang zwischen niederdimensionaler und äquidimensionaler Diskretisierung.

AP5: Adaptiver numerischer Mehrskalnlöser für das Gesamtsystem und Implementierung in d^3f und r^3t :

Die bereits im letzten Bericht erwähnte adaptive Verfeinerung mit hängenden Knoten auf Dreiecksgittern wurde nun auf Vierecksgitter sowie allgemeine 2-dimensionale Gitter mit gemischten Elementtypen erweitert. Bei der Erweiterung konnten wir dabei alle besonderen Merkmale des Verfeinerungsalgorithmus erhalten. Insbesondere konnte auch die beliebige wählbare Anzahl an hängenden Knoten auf gemischte Gitter übertragen werden. Um die Robustheit des Verfeinerungsalgorithmus zu gewährleisten wurden zahlreiche Testfälle implementiert und auf verschiedenen Testgeometrien erfolgreich ausgeführt. Die Ergebnisse waren dabei insbesondere auch auf 2-dimensionalen Kluft-Nachbildungen sehr vielversprechend. Um die Richtigkeit der Implementierung von Diskretisierung sowie Verfeinerung in 3 Dimensionen zu überprüfen, bedarf es wie auch im 2-dimensionalen Fall unterschiedlicher Testgeometrien. Um die Konstruktion solcher Geometrien zu ermöglichen, haben wir mit der Entwicklung von Algorithmen begonnen, die den 2-dimensionalen Querschnitt einer Kluft auf eine volle Volumengeometrie erweitern. Eigene Algorithmen sind hier nötig, um die komplexe Struktur der Geometrie innerhalb und an den Rändern der Kluft zu gewährleisten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 290.377,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Attinger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen d^3f und r^3t stehen Werkzeuge zur Verfügung mit denen die Modellierung der Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien mit expliziter Berücksichtigung von Klüften und Kluftsystemen möglich ist. Die in allen potenziellen Wirtsgesteinen bzw. den überlagernden geologischen Formationen auftretenden Inhomogenitäten und Klüfte sind aber für eine gesamtheitliche Betrachtung zu berücksichtigen.

Ziel des Verbundvorhabens ist die grundlegende Erweiterung der numerischen Modelle d^3f und r^3t auf heterogen-porösen und klüftig-porösen Medien (adaptives numerisches Mehrskalenmodell). Überdies werden die Präprozessoren zur Dateneingabe den erweiterten Anforderungen angepasst.

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete von der Gruppe Attinger (Universität Jena) bearbeitet:

- 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 Mehrskalenadaptivität
- AP6: Niederdimensionale Modellierung von Heterogenitäten und Klüften
- Entwicklung eines schnellen eindimensionalen Modells zur Durchführung von Szenarienuntersuchungen
 - Geostatistische Methoden
 - stochastische und fraktale Modellierung von Channeling

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es erfolgte die Einarbeitung von Frau Ross in die Nutzungsweise der Softwarepakete:

- der auf UG-basierte Kluftgenerator FRAC3D (entwickelt von der Arbeitsgruppe Prof. Dr. R. Helmig/ Uni Stuttgart)
- GeoSys/ Rockflow (entwickelt von der Arbeitsgruppe Prof. Dr. O. Kolditz/ UFZ Leipzig)

sowie in die theoretischen Grundlagen der Strömungs- und Transportmodellierung, insbesondere in konkrete Modellansätze wie das hierarchische Modell, das genetische Modell oder der Triple-Modell-Ansatz.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erweiterung der Upscaling-Methode „Coarse Graining“ bezüglich des Transports. Insbesondere umfasst dies:

- Berechnen der Integrale zur Beschreibung der Dispersivität (ensemble und effektiv), dabei soll insbesondere die Longitudinalkomponente genauer betrachtet werden. Bei diesen Integralen stellt sich vor allem die Frage nach deren Verhalten für Korrelationslängen, die gegen ∞ streben, weil diese in fraktalen Medien vorkommen.
- Ersetzen der Korrelationsfunktion und deren Anpassung an fraktale Medien
- Vergleich der Ergebnisse mit der Arbeit von Rubin et al. (1999).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
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 („uncertainty assessment“). Ursachen für Unsicherheiten können unterschiedlicher Natur sein: keine genaue Kenntnis der strukturgeologischen Bedingungen (Kluffsysteme, Heterogenitäten) aufgrund geringer Erkundungsdaten, Parametrisierungs- und Skalenprobleme. Für die Unsicherheitsanalyse soll das im Bereich „Contaminant Hydrology“ erfolgreich entwickelte und eingesetzte Konzept des „Virtuellen Aquifers“ (BMBF KORA Vorhaben, www.virtual-aquifer.de) für die Thematik der Kluffgesteine erweitert werden. Im AP8 sollen daher neben numerischen Lösern auch sog. Random-Walk/Particle-Tracking (RW/PT) Verfahren weiterentwickelt und angewendet werden. RW/PT repräsentieren das Vorwärtsproblem zwar mit geringerer Genauigkeit sind dafür robust und rechenzeit-effizient (Park et al. 2008). In Kombination mit dem Einsatz von Höchstleistungsrechnern kann sowohl die Genauigkeit von RW/PT-Verfahren verbessert werden als auch eine große Anzahl von Vorwärtsrechnungen (Monte-Carlo Analyse) im relevanten Parameterraum ausgeführt werden. Für die Bewertung der Genauigkeit und der Zuverlässigkeit numerischer Modelle ist die Entwicklung von systematischen Benchmark-Tests im AP9 von großer Wichtigkeit (Kolditz and Shao 2009). Dabei ist folgende Systematik von Testaspekten vorgesehen.

Kluff-Matrix Systeme: Kluff-Matrix Interaktion, Kluffsysteme (z. B. Grimsel-Scherzone), Kluff-Matrix-System,

Kopplung von Prozessen (systematisch zunehmende Komplexität): Hydraulik, insbesondere für Kluffrauhigkeiten (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, FEM, MFEM, hybride Methoden), Numerische (PDE-basierte) und Partikel-Methoden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Einstellung des Projekt-Wissenschaftlers Dr. Taron ist erfolgt. Herr Taron hat seine Dissertation an der Pennsylvania State University im Bereich der numerischen Geotechnik abgeschlossen (Taron et al. 2009, Taron und Elsworth 2009). In der ersten Projektphase wurden geeignete Testbeispiele (Benchmarks) für reaktive Transportprozesse in heterogenen und klüftig-porösen Medien entsprechend der im Antrag aufgeführten Beispielsammlung entwickelt. Dies erfolgte auf der Basis existierender im Programmsystem OpenGeoSys bereits implementierter Methoden, wie hybrider (numerisch-analytischer) Verfahren zur Simulation von Matrixdiffusionsprozessen in klüftig-porösen Medien (McDermott et al. 2009), RWPT Verfahren für heterogene poröse Medien (Park et al. 2008, Delfs et al. 2009) sowie von Verfahren für die Unsicherheitsanalyse gekoppelter THM Prozesse in heterogenen porösen Medien (Watanabe et al. 2009). Darüber hinaus wurde eine Trac/Wiki/SVN Projektplattform bereit gestellt und Schulungen zur Arbeit mit GINA und OpenGeoSys durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Projektphase stehen drei Schwerpunkte im Vordergrund. Erstens geht es um die Bereitstellung und die Dokumentation von Testbeispielen für die Hydraulik von Kluffnetzwerken und Kluft-Matrix-Systemen sowie den konservativen Stofftransport für den Methoden- und Code-Vergleich. Zweitens werden Methoden für die Unsicherheitsanalyse weiterentwickelt (RW/PT in Kluffnetzwerken). Drittens werden Visualisierungsmethoden für die Darstellung der komplexen Prozesse bereit gestellt. Die Visualisierung erfolgt auf der Basis der plattformunabhängigen C++GUI open source Software Qt. Für die Prozess- und Unsicherheitsanalyse werden Möglichkeiten der stereoskopischen 3D-Visualisierung ausgenutzt (Zehner et al. 2009).

5. Berichte, Veröffentlichungen

U. a. Vorarbeiten, welche die Basis für die geplanten Forschungsarbeiten bilden.

Delfs J-O, Kalbus E, Park C-H, Kolditz O (2009): Ein physikalisch basiertes Modellkonzept zur Transportmodellierung in gekoppelten Hydrosystemen, Grundwasser, DOI: 10.1007/s00767-009-0114-0.

Kolditz O and Shao H (eds.) (2009): OpenGeoSys - DeveloperBenchmarkBook, V4.10, Internet Report, available at www.opengeosys.de Helmholtz Centre for Environmental Research (UFZ) and Federal Institute for Geosciences and Natural Resources (BGR).

OpenGeoSys (2009): www.opengeosys.net. Helmholtz Centre for Environmental Research (UFZ).

McDermott CI, Walsh R, Mettler R, Kosakowski G and Kolditz O (2009): Hybrid analytical and finite element numerical modeling of mass and heat transport in fractured rocks with matrix diffusion, Computational Geosciences, DOI: 10.1007/s10596-008-9123-9.

Park C-H, Beyer C, Bauer S, Kolditz O (2008): A study of preferential flow in heterogeneous media using random walk particle tracking. Geosciences Journal, vol. 12(3): 285-297.

Taron J, Elsworth D, Min KB Numerical simulation of thermal-hydrologic-mechanical-chemical processes in deformable, fractured porous media. INTERNATIONAL JOURNAL OF ROCK MECHANICS AND MINING SCIENCES Volume: 46 Issue: 5 Pages: 842-854 Published: JUL 2009.

Taron J, Elsworth D (2009): Thermal-hydrologic-mechanical-chemical processes in the evolution of engineered geothermal reservoirs. INTERNATIONAL JOURNAL OF ROCK MECHANICS AND MINING SCIENCES Volume: 46 Issue: 5 Pages: 855-864 Published: JUL 2009

Watanabe N, McDermott C, Wang W, Taniguchi T, Kolditz O (2009): Uncertainty analysis of thermo-hydro-mechanical processes in heterogeneous geothermal reservoirs. Computational Mechanics, in revision.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 10598
Vorhabensbezeichnung: Externer unabhängiger Review des im Vorhaben Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW (ISIBEL) erstellten FEP-Katalogs		
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: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 52.847,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Röhlig	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des BMWi-FuE-Projektes ISIBEL wurde erstmals ein FEP-Katalog für die Endlagerung ausgedienter Brennelemente und anderer hochradioaktiver Abfälle (HAW) mit nennenswerter Wärmeentwicklung in einem Salzstock erstellt. Dieser Katalog ist das Ergebnis einer gemeinsamen Erarbeitung durch Experten von BGR, DBE TECHNOLOGY GmbH und GRS. Erfahrungsgemäß sind subjektive Prägungen in der Struktur des FEP-Katalogs, der Art der FEP-Beschreibungen und der FEP-Beschreibungen selbst nicht ausgeschlossen. Mit dem Ziel der Erhöhung der Transparenz und Nachvollziehbarkeit soll daher eine Gruppe von nicht am Projekt

ISIBEL beteiligten Experten einen nationalen Review des FEP-Katalogs durchführen. Der Review des FEP-Kataloges dient u. a. auch dazu, Erfahrungen hinsichtlich der Vorgehensweise bei künftigen Reviews zu sammeln.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Review des FEP Katalogs

AP2: Besprechungen und Konsultationen

AP3: Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Der Review des FEP Katalogs in seiner Gesamtheit und mit Bezug auf die Einzeleinträge durch die beteiligten Experten ist abgeschlossen.

AP2: In einem internen Treffen der Review-Gruppe (im Februar) wurde das weitere Vorgehen diskutiert und der Meinungsbildungsprozess vorangetrieben. In mehreren Treffen (im April und Juni) haben die Reviewer den Autoren des FEP-Katalogs ihre Fragen und Kommentare mitgeteilt und diese mit den Autoren diskutiert. Die Autoren haben auf diesen Fragenkatalog schriftlich geantwortet.

AP3: Es wurde ein Fragenkatalog erstellt, die Antworten der Autoren bei den Review-Meetings wurden in Hinblick auf die Berichtserstellung dokumentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Abschlussbericht befindet sich in der Vorbereitung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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: 01.11.2008 bis 30.06.2009	
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 Hintergrundsätze
- Entwicklung einer Programmgruppe zur Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse für geochemische Modellierungen

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Untersuchung der Löslichkeit von H₂S und Bestimmung der Aktivitätskoeffizienten von Hydrogensulfid in salinaren Lösungen bei 15-40 °C. Untersuchung der thermodynamischen Stabilität ausgewählter Schwermetallsulfide und –sulfidokomplexe.
- Kritische Literaturlauswertung zu kolligativen Eigenschaften von Hintergrundsätzen (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

- Aufbau der Messapparatur für das bestehende Messverfahren zur Bestimmung der druckabhängigen H_2S -Löslichkeit in unterschiedlich konzentrierten Salzlösungen (nach Moog, Hagemann 2005)
- Durchführung erster Testmessungen mit obiger Messvorrichtung mit Wasser als Lösungsvorlage
- Verbesserung des Messverfahrens (Vereinfachung der Handhabung)
- Beginn der Literaturlauswertung zu kolligativen Eigenschaften von Hintergrundsalzlösungen. Aufbau der Apparatur zur Messungen von Dampfdrücken über Lösungen bis $90\text{ }^\circ\text{C}$.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterentwicklung des oben genannten Verfahrens und Durchführung von Messreihen zur Bestimmung der H_2S -Löslichkeiten in ozeanischen Salzen. Geplant sind zunächst Druckmessungen mit MgCl_2 - bzw. CaCl_2 -Lösung bei $25\text{ }^\circ\text{C}$. Im Anschluss sollen Messungen bei einer Temperatur von $15\text{ }^\circ\text{C}$ und $40\text{ }^\circ\text{C}$ erfolgen. Hier wird mit den chloridischen Salzen (NaCl , KCl , MgCl_2 , CaCl_2) begonnen. Im Anschluss daran werden die H_2S Löslichkeiten für sulfatische Systeme (Na_2SO_4 , K_2SO_4 , Mg_2SO_4) ermittelt.

Nach Abschluss des ersten Arbeitspaketes soll die Messapparatur dahingehend variiert werden, dass die Bestimmung von Hydrogensulfid Löslichkeiten in ozeanischen Salzlösungen möglich ist. Spezielle Messgefäße aus Glas werden dafür beschafft und mit pH Elektroden ausgestattet.

Abschluss der Literaturübersicht zur Hintergrundsalzen, Fertigstellung der Apparatur und Beginn des Messprogramms.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum 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: 01.01.2009 bis 30.06.2009
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 geochemische 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

- Ausschreibung und Besetzung der Doktorandenstelle zur Thematik: Mikrobielle Diversität im Tongestein (ab 01.04.2009)
- Ausschreibung und Besetzung der Wissenschaftlerstelle zur Thematik: Mikrobielle Diversität im Tongestein (ab 01.10.2009)
- Ausschreibung und Besetzung der Doktorandenstelle zur Thematik: Wechselwirkungen der Actiniden mit relevanten Mikroben im Tongestein (voraussichtlich ab 01.08.2009)
- Teilnahme am Mont Terri Joint MA, PC, PC-C Meeting in Bern (10./11.03.2009)
- Probenahme von sterilen anaeroben Opalinus-Tonbohrkernen im Mont Terri Rock Laboratory (21.04.2009): Tunnel 08, zwei Proben aus unterschiedlicher Tiefe a) 9.5 bis 11 m (Probe 1) und b) 13.6 bis 14.5 m (Probe 2)
- Beginn der molekularbiologischen Arbeiten zur direkten Bestimmung der mikrobiellen Diversität im Opalinus-Ton; Anpassung der molekularbiologischen Methoden zur direkten Detektion von Mikroben im Tongestein: (A) Tests zur Anwendbarkeit der DNA-Extraktionsmethode auf Ton (Impfen des Opalinus-Tons aus Mont Terri (Probe 1 5.6 g) mit 1.7×10^4 Zellen/ml *Escherichia coli*, (B) Gesamt-DNA-Extraktion und PCR Amplifizierung aus 0.65 g Opalinus-Ton (Probe CJ) der unter aeroben Bedingungen mit 0.1 M NaClO₄ - Lösung im pH Bereich 3-9 equilibriert wurde

Ergebnisse AP1: Direkte mikrobielle Diversität im Opalinus-Ton:

Versuch (A): nach Impfen konnten aus 5.6 g Ton (Probe 1) rund 150 ng Gesamt-DNA isoliert werden, nach PCR Amplifizierung und Restriktionsfragment-Längenpolymorphismus (RFLP) Analyse nur *Escherichia coli* nachweisbar, Detektionslimit der Methode zur Gesamt-DNA Extraktion liegt bei ca. 3×10^3 Zellen pro g Ton;

Versuch (B): kein Impfen mit *Escherichia coli*, Gesamt-DNA isoliert Konzentration unter 10 ng/ml (wahrscheinlich Besiedelung des Tons während der Equilibrierungsversuche), PCR Amplifizierung und Klonbibliothek mit 52 Klonen erstellt, mittels RFLP 4 Bakteriengruppen nachweisbar; Anwendbarkeit der entwickelten Technik zur Isolierung von mikrobieller Gesamt-DNA aus Tongestein.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung der Diversitätsuntersuchungen im Opalinus-Ton, weitere Versuche zur Gesamt-DNA Extraktion aus Tonproben (z. B. mit unbehandeltem Opalinus-Ton)
- Sequenzierung der Klone verschiedener Ton-Klonbibliotheken zur Bestimmung der dominierenden Bakteriengattungen
- Planung und Beginn der Untersuchungen zur Kultivierung/Aktivierung Opalinus-Ton spezifischer Bakterien (Auswahl der Medien, Optimierung der Versuchsdurchführung)
- Planung und Beginn der Untersuchungen zum Nachweis von Archaeen im Opalinus-Ton
- Erfassung aller relevanten Literatur zur Wechselwirkung von Mikroorganismen mit Actiniden zur Erstellung einer Datenbank (Start mit Thematik Uran und Mikroben)
- Teilnahme an der internationalen Konferenz Migration`09 vom 20.9. bis 25.9.2009 in Kennewick (USA)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: Öko-Institut e.V. - Institut für angewandte Ökologie, Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg		Förderkennzeichen: 02 E 10628
Vorhabensbezeichnung: Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2008 bis 28.02.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 199.347,00 EUR	Projektleiter: Sailer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist die Aufstellung konkreter Anforderungen zur Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte in einem Safety Case für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle in Deutschland. Dazu wird eine methodisch abgesicherte Liste sozialwissenschaftlicher Aspekte, die im Safety Case behandelt werden sollten, erstellt und die Anforderungen zu deren Integration in einen Safety Case für ein Endlager abgeleitet.

Das Vorhaben trägt dazu bei, für die Endlagersicherheit relevante sozialwissenschaftliche Aspekte zu identifizieren, zu bewerten sowie Bedarf und Möglichkeiten ihrer Integration in die technisch-naturwissenschaftlich orientierten Sicherheitsbetrachtungen zu prüfen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Identifikation sozialwissenschaftlicher Aspekte für den Safety Case
Unter Berücksichtigung nationaler und internationaler Erfahrungen werden potenziell relevante sozialwissenschaftliche Aspekte identifiziert und hinsichtlich ihrer Relevanz für die Sicherheit eines Endlagers bewertet.
- AP2: Klassifizierte Liste sozialwissenschaftlicher Aspekte für den Safety Case
Die in AP1 identifizierten sozialwissenschaftlichen Aspekte werden hinsichtlich ihrer Wirkmechanismen und ihrer grundlegenden Merkmale eingeordnet und in einer vollständigen klassifizierten Liste relevanter sozialwissenschaftlicher Aspekte zusammengestellt.
- AP3: Anforderungen an einen „Integrierten Safety Case“ hinsichtlich der Behandlung der sozialwissenschaftlichen Aspekte
Es werden Anforderungen zusammengestellt, die im Hinblick auf die Behandlung der sozialwissenschaftlichen Aspekte an einen Safety Case für ein Endlager in Deutschland zu stellen sind, insbesondere bezüglich Aufbau, Fortschreibung und iterativer Weiterentwicklung.
- AP4: Methodischer Ansatz zur Entwicklung und Gestaltung eines „Integrierten Safety Case“

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im ersten Halbjahr 2009 wurden die Arbeitspakete AP1 und AP2 weitgehend abgeschlossen. Ein Meilenstein war in diesem Zusammenhang die Durchführung eines Fachworkshops mit interdisziplinärer Besetzung. Im Vorfeld des Workshops wurde ein Kurzbericht erstellt und an die Teilnehmer und Teilnehmerinnen verschickt, der die bis dahin vorliegenden Arbeitsergebnisse zusammenfassend darstellt.

Schwerpunkte der Diskussion waren:

- Die im Forschungsvorhaben gewählte Herangehensweise und der methodische Ansatz zur Ermittlung sozialwissenschaftlicher Aspekte und
- die Definition und Begründung der Handlungsfelder mit sozialwissenschaftlichem Bezug und ihre Einordnung hinsichtlich der Relevanz.

Unter Berücksichtigung der Ergebnisse des Workshops wurde der Zwischenbericht zu den Arbeitspaketen AP1 und AP2 erstellt.

Als umsetzungsorientierte Grundlage für die weiteren Arbeiten enthält der Bericht eine Liste der identifizierten endlagerrelevanten Handlungsfelder mit sozialwissenschaftlichem Bezug. Diese Handlungsfelder werden in standardisierten Datenblättern näher beschrieben, wobei die in dem jeweiligen Kontext relevanten sozialwissenschaftlichen Aspekte herausgearbeitet werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die geplante Weiterarbeit sieht folgende Arbeitsschritte vor:

- Aufnahme der Arbeiten zum AP3
- Vorbereitung und Durchführung des zweiten Fachworkshops
- Erstellung eines Zwischenberichtes unter Berücksichtigung der Ergebnisse aus dem zweiten Workshop und Abschluss der Arbeitspakete AP3 und AP4

5. Berichte, Veröffentlichungen

Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case. Kurzbericht für den Workshop am 10.02.2009; Darmstadt, 28.01.2009

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: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
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 23. und 24. Juni 2009 fand ein erster Workshop zum Thema „Strategie und Ziele einer Endlagerüberwachung“ in Paris statt. Der Workshop wurde von Andra, dem Koordinator des MoDeRn-Projektes ausgerichtet. Ziel war es, zunächst für alle Projektpartner ein einheitliches Verständnis zu entwickeln bzw. zu definieren, was Ziele bzw. Teilziele und was unter einer Strategie zur Endlagerüberwachung zu verstehen ist.

In Vorbereitung auf diesen Workshop wurden mit Blick auf das Deutsche Endlagerkonzept und auf die bereits laufenden Überwachungsmaßnahmen an den derzeitigen Endlagerstandorten zunächst beispielhaft Ziele und Teilziele definiert. Diese beziehen sich zunächst auf den Bereich der betrieblichen Sicherheit. Den jeweiligen Teilzielen wurden Prozesse zugeordnet, deren Beobachtung notwendig erscheint, um das angestrebte Überwachungsziel zu erreichen. Die identifizierten Prozesse sind durch Gesetzmäßigkeiten und entsprechende Parametern beschreibbar. Letztere stellen die Größen dar, die direkt oder indirekt durch geotechnische oder geophysikalische Mess-Systeme erfasst bzw. in ihrer zeitlichen und/oder räumlichen Entwicklung beobachtet werden können. Um sowohl die Sinnfälligkeit als auch die technische Realisierbarkeit zur Überwachung eines Parameters zu prüfen, wurde ein erster Parameter-Screening-Prozess erarbeitet, der im Weiteren noch verfeinert und weiter entwickelt werden soll.

Auf Basis der Workshopergebnisse wurde ein vorläufiger Ablaufplan zur Aufstellung eines Monitoring-Programms erarbeitet und Schlüsselemente eines solchen Programms wurden identifiziert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

Inhaltliche Vorbereitung eines weiteren Workshops zum Thema „Strategie und Ziele einer Endlagerüberwachung“. Dieser Workshop wird in Madrid stattfinden. Es ist geplant, den bisherigen Ablaufplan zur Aufstellung eines Monitoring Programms zu verfeinern unter besonderer Berücksichtigung nationaler Gegebenheiten. Es soll der Versuch unternommen werden, nationale Zielsetzungen so weit wie möglich unter ein gemeinsames Dach zu stellen.

AP2:

Entwicklung einer ersten Fallstudie zur Überwachung eines Endlagers in einer ausgewählten Wirtsformation unter Berücksichtigung unterschiedlicher Endlagerkonzepte. Die Fallstudie soll sowohl den sofortigen sicheren Einschluss als auch eine mögliche Rückholung der radioaktiven Abfälle berücksichtigen. Sicherheitstechnische und damit überwachungsrelevante Unterschiede sollen aufgezeigt werden.

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: 01.04.2009 bis 30.06.2009
Gesamtkosten des Vorhabens: 975.614,00 EUR	Projektleiter: Dr. Keesmann

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 Permeationsprozessen 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: Es fanden Sondierungsgespräche zur Entwicklung einer Modellierungskonzeption und zur Visualisierung der Wegsamkeiten im Steinsalz mit unterschiedlichen Verfahren statt. Erste Testaufnahmen wurden erstellt. Die Arbeiten zur Darstellung der Wegsamkeiten und der Modellierung der injektionsbedingten Veränderung des Permeationsverhaltens haben begonnen.
- AP2: Für die Untersuchungen zur chemischen Langzeitstabilität sowie der Festigkeitsuntersuchungen wurden für die Auftragnehmer Probekörper mit Wasserglas präpariert. Dem beauftragten Hersteller des Injektionsmittels ist die Einfärbung des Wasserglases gelungen, was die Darstellung der Ausbreitung des Injektionsmittels im Wirtsgestein erleichtern soll. Erweiterte spektrografischer Analysen wurden beauftragt und erste Testanalysen durchgeführt.
- AP3: Es wurde ein geeigneter Standort im Salinar für die Durchführung der untertägigen In-situ-Injektionen gefunden. Mit dem Bergwerksbetreiber wurden vertragliche Vereinbarungen zur Bereitstellung des Injektionsstandorts einschließlich der notwendigen Infrastruktur getroffen. Die Planungen zur Durchführung der Maßnahme haben begonnen. Die Arbeiten zur Installation des Oberflächenpackers wurden abgestimmt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: - Entwicklung einer Modellierungskonzeption
 - zur Darstellung des System der Wegsamkeiten (SW)
 - zur Bestimmung der Permeabilitätsänderung durch Injektionen in das SW
 - Implementierung
- AP2: - Betreuung der Versuche zur mechanischen Festigkeit
 - Betreuung der Untersuchung zur chemischen Langzeitstabilität
 - Dünnschliffpräparation einzelner Proben
 - Durchführung erweiterter chemischer Analysen
- AP3: - Detaillierte Planung und Durchführung der In-situ-Injektionen
 - Permeabilitäts- und Injektionsmessungen

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: 01.02.2009 bis 30.06.2009	
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-Dichteelementen, 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. Schwerpunktartig 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

Das „Start-Up-Meeting“ zum FORGE-Vorhaben fand am 24. Februar 2009 in Äspö (S) unter Beteiligung aller Partner statt, wobei auch das Felslabor Äspö besichtigt wurde.

Die Auftaktveranstaltung für das AP3 „Engineered barrier systems“ mit Vorstellung der verschiedenen Vorhaben sowie Abstimmung der einzelnen Arbeiten wurde am 6. – 7. Mai 2009 in Leipzig beim IfG durchgeführt.

AP1: Die Literaturstudie zum Gastransporterhalten von kompaktierten Bentonit-Formsteinen unter besonderer Berücksichtigung von Trennflächen wird unter Beteiligung aller Partner des AP3 „Engineered barrier systems“ unter Federführung des IfG durchgeführt, wobei der Bericht zum Ende des Jahres 2009 erstellt werden soll.

Eine Vorabstimmung der geplanten individuellen Beiträge fand während des 1. Arbeitstreffens der beteiligten Partner in Leipzig statt.

AP2: Die Konstruktion der neuen Messzellen zur radialen Durchströmung von Bentonit-Aggregaten mit Trennflächen liegt vor und wird aktuell mit dem Bau von 3 Zellen umgesetzt. Für die Durchführung der Untersuchungen wurden von der BA Freiberg (Hr. Dr. Gruner) Bentonit-Formsteine FS40 bereitgestellt, die im Rahmen des Streckenverschlussvorhabens Sondershausen produziert wurden.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Durchführung der Literaturstudie.

AP2: Nach Prüfung der technischen Funktionsfähigkeit der neuen Druckzellen wird mit dem 1. Schritt der geplanten experimentellen Untersuchungen, d. h. Aufsättigung der Bentonitkörper begonnen.

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: 01.05.2009 bis 30.06.2009	
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: Formulierung der offenen Fragen aus dem Vorhaben Kollorado 1.

AP3: Formulierung eines detaillierten Arbeitsplans für den Beitrag der GRS zur Vorbereitung des ersten Arbeitsgesprächs mit dem FZK-INE.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Auswertung neuer Daten aus Sorptionsexperimenten, die über noch längere Zeiträume als bisher gelaufen sind, zur Aktualisierung der Sorptionskoeffizienten und –raten für Plutonium, Americium und Neptunium.

Überprüfung der Experimente zur Wechselwirkung von Kolloiden mit Mineraloberflächen und ggf. Aktualisierung der Parameter für die „Deep-Bed“ Filtration.

Erstellung konzeptueller Modelle für neue Dipolexperimente im Rahmen des CFM-Projektes, bei denen zur besseren Vergleichbarkeit der ideale Tracer zusammen mit den kolloidgetragenen Radionukliden im selben Experiment eingesetzt wird. Durchführung weiterer Modellrechnungen mit d^3f / r^3t zur Überprüfung, ob die Durchbruchkurven der Radionuklide beschrieben werden können und zur Untersuchung der Zulässigkeit einer Extrapolation auf andere Extraktionsgeschwindigkeiten.

AP3: Durchführung eines ersten Arbeitsgesprächs mit dem FZK-INE zur Detailplanung der einzelnen Aufgaben und Abstimmung der Arbeiten am 23./24. Juli in Karlsruhe.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 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: 01.05.2009 bis 30.06.2009	
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 Kluftgeometrie 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:

Ein neues Laborprogramm wird momentan in Kollaboration mit GRS abgestimmt. Weiterhin sind die Personalentscheidungen zur Besetzung einer Doktorandenstelle und der Postdoc-Stelle noch nicht abgeschlossen. Die zweite Doktorandenstelle wurde bereits besetzt.

Weitere Proben von bereits im Rahmen des KOLLORADO-Projekts angesetzten Experimenten zur Radionuklid-Kolloid-Desorptionskinetik (312 Tage) sind im ersten Halbjahr 2009 charakterisiert worden.

Migrationsexperimente an einem Bohrkern aus Äspö (Kern #8) unter Grimsel-Grundwasser Bedingungen wurden für eine Verweilzeit durchgeführt. Für diesen Kern existieren detaillierte μ CT-Daten ($80 \mu\text{m}^3$ Voxelgröße), die bereits in ein hydraulisches Modell implementiert wurden (ADINA-F) um zwischen den Mechanismen der Fließkanalheterogenität und Matrixdiffusion als Rückhalte-mechanismen für den Kolloid- und Radionuklidtransport zu differenzieren.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.1:

Die Versuche zur Reversibilitätskinetik zeigten eine Abhängigkeit der Desorptionsrate k_3 von der spezifischen Oberfläche des Kluftfüllmaterials. Weitere Experimente unter gezielter Variation des Volumen/Masse-Verhältnisses sind geplant. Ergänzende Migrationsstudien mit permanenter Injektion sind angedacht, um In-situ- k_3 -Desorptionsraten zu bestimmen und diese mit den oben erwähnten Batch-Experimenten zu vergleichen. Die Kolloid-Migrationsversuche im „Mock-up“ Test sind abgeschlossen und ein kompakter, markierter Febex-Bentonitkörper soll in einem nächsten Schritt in die Kluft eingebaut werden um die Kolloidgeneration unter Fließgeschwindigkeiten vergleichbar dem integralen In-situ-Experiment in Grimsel Felslabor zu testen.

AP1.2:

Nach Einbau des modifizierten Megapacker-Systems ist im September 2009 ein weiterer Homologtest unter höheren Scherzonen-Verweilzeiten (ca. 10 h) geplant. Die Analyse dieser Proben mittels ICP-MS, LIBD und S-Kurven LIBD (Kolloidkonzentration und –größenverteilung) obliegt dem INE.

Weiterhin ist der Start des geochemischen Hintergrundmonitoring Programm der MI- Scherzone ab August 2009 geplant. Es werden Anoxische Proben in Gasdruckzylindern abgefüllt, vom Felslabor an das INE geliefert und Gesamtanalysen bezüglich Anionen, Kationen, gelöster organischer Kohlenstoff (DOC) und Kolloidkonzentration sowie –größenverteilung am INE durchgeführt. Dieses Messprogramm dient der Quantifizierung der natürlichen Schwankungsbreite der Kolloidkonzentration innerhalb eines hydrogeologischen Jahres.

AP2.5:

Am Beispiel eines Dipolexperiments (Run 08-02) sollen die Rechencodes ADINA-F und r^3t (d^3f) von GRS Braunschweig unter identen Randbedingungen verglichen werden. Weiterhin werden Modellrechnungen zum neuen im September 2009 geplanten In-situ-Experiment (Homologen Test) durchgeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Peer-reviewed eingereicht oder in Vorbereitung:

Seher H., Hauser W., Geckeis H., Fanghänel T., and Schäfer T. (2009, in prep.) Bentonite nanoparticle stability and effect of fulvic acids: experiments and modelling. Applied Clay Science.

Huber F. and Schäfer T. (2009, in prep.) Sorption and reversibility studies on the interaction of radionuclides with FEBEX bentonite under Grimsel groundwater conditions in the presence of Äspö and Grimsel fracture filling material. Applied Geochemistry.

Filby, A., Plaschke, M., Geckeis (2009, in prep.) AFM force spectroscopy study of carboxylated latex colloids interacting with mineral surfaces. J. Colloid and Interface Science

2.2 C-Vorhaben

Zuwendungsempfänger: Universität Karlsruhe (TH), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe		Förderkennzeichen: 02 C 0922
Vorhabensbezeichnung: Verschlussystem mit Äquipotenzialsegmenten für die untertägige Entsorgung (UTD und ELA) gefährlicher Abfälle zur Sicherstellung der homogenen Befeuchtung der Dichtelemente und zur Verbesserung der Langzeitstabilität		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2002 bis 30.06.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.226.844,00 EUR	Projektleiter: Dr. Schuhmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Geotechnische Barrieren (Schacht-, Strecken- und Bohrlochverschlüsse) in UTD sind als nachweislich langzeitstabile Verschlussbauwerke auszubilden. Vorhabensziel ist das Design, der konstruktive Entwurf und der Bau eines Verschlussystems, das mittels Äquipotenzialsegmenten eine homogene Durchfeuchtung des dichtenden Bentonitkerns gewährleistet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzeption des Verschlussystems, Versuchsplanung, Grundlagenermittlung
- AP2: Untersuchung der Materialien für die Dicht- (DS) und Äquipotenzialsegmente (ÄS)
- AP3: Modellierung der Vorgänge im Verschluss
- AP4: Halbtechnischer Versuch, Durchführung und Bewertung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP3: Numerische Simulation

Die Bearbeitung der AP 3 wurde im Unterauftrag von der Bauhausuniversität Weimar/Ruhruniversität Bochum abgeschlossen und die Ergebnisse anlässlich der Projektsitzung am 23. Juli 2009 vorgestellt und verabschiedet.

AP4: Halbtechnischer Versuch, Durchführung und Bewertung

HTV3: Abschluss und Ausbau HTV-3 mit den erforderlichen Beprobungen (Feuchte, Dichte, ...), Bergung der TAUPE-Sensoren und Erstellung der zugehörigen Berichte (TU Freiberg, Uni-Karlsruhe)

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Projekt wurde zum 30. Juni 2009 beendet. Der Schlussbericht wird derzeit gefertigt und fristgerecht der Projektträgerschaft vorgelegt.

Die beantragte Verlängerung und Aufstockung des Projektes mit den zugehörigen Arbeiten: mineralogische Auswertung des HTV-3, Klärung der Wechselwirkungen an der Grenzfläche Äquipotenzialsegment/Dichtsegment, Scale-up zum nahe 1:1-Maßstab und Klärung der Bau-technik, wurde leider abgelehnt. Somit wird lediglich die Hydraulik des HTV-3 noch in den Schlussbericht Eingang finden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Auf der Homepage (www.untertageverschluss.de) ist ein ausführlicherer Sachstandsbericht dazu eingestellt. Publikationen:

Saturation process and bentonite transformation in a multi-layer hydraulic sealing system (HTV-1) exposed to rock salt brine (Katja Emmerich, Gerhard Kemper, Franz Königer, Stefan Schlaeger, Matthias Gruner, Wolfgang Gaßner, Martin Hofmann, Rolf Nüesch (†), Rainer Schuhmann) wurde zur Publikation in *Vadose Zone Journal* akzeptiert und ist Anfang 2009 erschienen.

Die Präsentation der bisher erzielten Ergebnisse aus dem HTV-1 und HTV-2 im Rahmen der Mid European Conference

Emmerich, K., Kemper, G., Königer, F., Buqezi-Ahmeti, D., Schlaeger, S., Gruner, M., Gaßner, W., Hofmann, M., and Schuhmann, R. (2008) Mineralogical reactions in a multi-layer hydraulic sealing system during saturation with a rock salt brine. Mid European Clay Conference, Zakopane, Poland.

Emmerich, K., Kemper, G., Königer, F., Buqezi-Ahmeti, D., Gruner, M., Gaßner, W., Hofmann, M., and Schuhmann, R. (2008) Sandwich - sealing system with equipotential layers for underground storage of hazardous waste to ensure homogeneous wetting of sealing layers and to enhance long term stability. Bodenkundliche Kolloquium, Institut für Bodenkunde und Standortslehre, Universität Hohenheim.

Material development for equipotential layers of multi-layer hydraulic sealing systems (Gerhard Kemper, Franz Königer, Rainer Schuhmann, Katja Emmerich) ist bei Applied Clay Science eingereicht.

Präsentation der Ergebnisse auf der Tagung der TU-Freiberg im Oktober 2009.

Zuwendungsempfänger: Materialforschungs- und prüfanstalt an der Bauhaus-Universität Weimar, Coudraystraße 9, 99423 Weimar		Förderkennzeichen: 02 C 1064
Vorhabensbezeichnung: Weiterentwicklung eines TDR-Messverfahrens zur Quantifizierung von Feuchte- und Dichte- verteilungen in Bentonitversuchsbauwerken		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponienkonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2004 bis 28.02.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 28.02.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 603.656,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kupfer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Arbeitsablauf erfolgen Untersuchungen zu dielektrischen Materialeigenschaften, Feldsimulationen zur Kalibrierung von Sensoren, zur Rekonstruktion (Ortsauflösung) von Feuchte- und Dichteverteilung. Test des neuen Messverfahrens in labor- und halbtechnischen Versuchen zur Detektion der räumlichen und zeitlichen Flüssigkeitsausbreitung in Bentonitdichtelementen. Hydraulische Modellierung auf Grundlage von messtechnisch ermittelten Feuchte- und Dichteverteilungen. Auf Basis der Untersuchungsergebnisse soll ein Messsystem für den Einsatz in horizontalen Verschlussbauwerken entworfen werden. Test des Messverfahrens an Verschlussbauwerken im Carnallitit (Teutschenthal, Projekt CARLA FKZ 02C1204). Eine Anpassung des Vorhabens an das Projekt CARLA erfolgt durch Erweiterung der Untersuchungen um die Arbeitspakete AP10 und AP11 (Aufstockung und Verlängerung des Vorhabens).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Untersuchungen zu dielektrischen Materialeigenschaften
- AP2: Elektromagnetische Feldsimulationen zur Rekonstruktion von Feuchte-
/Dichteverteilung
- AP3: Quantifizierung von Feuchte und Dichte mit koaxialer Messleitung und Kabelsensor
- AP4: Ortsdiskretisierung von Feuchteprofilen
- AP5: Erfassung der räumlichen Feuchte- und Dichteverteilung
- AP6: Bestimmung von Feuchteprofilen in Abhängigkeit vom Druck
- AP7: Anwendung des TDR-Messsystems in halbtechnischen Versuchen
- AP8: Numerische Simulation der Feuchteausbreitung
- AP9: Konzeption und Entwurf eines Messerätesystems für den Untertageinsatz zur quantitativen Bewertung von Feuchte- und Dichteprofilen
- AP10: Entwicklung und Erprobung eines Messerätesystems zur qualitativen Bestimmung von Feuchteprofilen in einem Verschlussbauwerk; Erarbeitung und Erprobung von Simulations- und Rekonstruktionsalgorithmen

AP11: Entwurf eines Messsystems zur quantitativen Bewertung von Feuchte- und Dichteprofilen für den Einsatz in Verschlussbauwerken im Projekt CARLA (FKZ 02C1024), Einbau der Messsysteme in die Versuche KV1, GV1, GV2 und Auswertung der Versuchsergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Dokumentation der an der MFPA entwickelten TDR-Simulations- und Inversionsmodelle
- Fortführung der Auswertung der TDR-Messergebnisse aus dem Projekt CARLA
- Beginn der Arbeiten zum Abschlussbericht

4. Geplante Weiterarbeiten

- Keine (Ende des Vorhabens)
- Weiterführung der TDR-Messungen in Teutschenthal bis zum Projektende von CARLA 06/2010 (Finanzierung durch die GTS GmbH)

5. Berichte, Veröffentlichungen

K. Kupfer, E. Trinks, N. Wagner, M. Kuhne, B. Müller: TDR-Measurements in Underground MgO-Concrete Barriers for Hazardous Waste in Salt Mines. Proc. 8th International Conference Electromagnetic Wave Interaction with Water and Moist Substances, Helsinki, Finland 2009

Zuwendungsempfänger: GTS Grube Teutschenthal Sicherungs GmbH & Co. KG, Straße der Einheit 9, 06179 Teutschenthal		Förderkennzeichen: 02 C 1204
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leichtlöslichen Salzgestein (Carnallit); Teil 2: Erprobung von Funktionselementen in situ		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2004 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 6.950.390,00 EUR	Projektleiter: Finder	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben schließt an das Vorhaben 02C0942 an. Es dient der Vervollständigung und großmaßstäblichen Verifizierung des dort erarbeiteten Grundkonzeptes und der dazugehörigen Bemessungsgrundlagen für die Errichtung von Streckendämmen in leichtlöslichen Salzgesteinen, insbesondere im Carnallit.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Planung eines Versuchsbauwerkes und seiner einzelnen Funktionskomponenten
- AP2: Auswahl der Einbaustandorte für die einzelnen zu untersuchenden Funktionselemente des komplexen Absperrbauwerkes
- AP3: Entwicklung eines interdisziplinären Messkonzeptes zum Nachweis der geplanten Eigenschaften der Dammbaumaterialien und des Umgebungsgesteins sowie ihres Verhaltens im Zeitverlauf; Funktionssicherung des Bauwerkes
- AP4: Untersuchungen zur Abdichtung der Kontaktzone und des unmittelbar daran anschließenden Gebirgsbereiches in der Einbauzone
- AP5: Labor- und In-situ-Untersuchungen zu den im Konzept (AP1) aufgeführten Verschlusselementen und Materialien
- AP6: Modellrechnungen für das Komplettbauwerk (Dammelemente, Fuge, ALZ, unverritztes Gebirge)
- AP7: Errichtung von Funktionselementen (Module)
- AP8: Konzipierung, Errichtung und Test geeigneter „Vorbau“-Elemente
- AP9: Messtechnische Kontrolle und Überwachung mit Vergleich der Messwerte mit den Berechnungsergebnissen zum geomechanischen und hydraulischen Verhalten
- AP10: Verarbeitung der Ergebnisse zu Prüfkriterien und Testanforderungen für Absperrbauwerke der untersuchten Kategorie
- AP11: Berichtsfassung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Abgeschlossen.

AP2: Abgeschlossen.

AP3: Abgeschlossen.

AP4: Abgeschlossen.

AP5: Fast abgeschlossen, nur noch Restarbeiten.

AP6: Die numerischen geomechanischen Modellberechnungen wurden für den GV1 und GV2 so weit präzisiert, dass die Ergebnisse für die Steuerung des Versuches (Belastungsaufgabe) zur Verfügung stehen.

AP7: Der Aufbau der Dammkörper für den GV1 sind abgeschlossen. Derzeit erfolgt die Phase der Ausbildung eines Gleichgewichtes als Voraussetzung für die Lastaufgabe.

AP8: An beiden Vorbauerelementen wurden die In-situ-Untersuchungen fortgesetzt.

AP9 bis AP11: sind in Bearbeitung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Beim GV1 und GV 2 wird die Konsolidierungsphase messtechnisch verfolgt und in Abhängigkeit von dieser Phase und der angestrebten erfolgreichen Abdichtung der Kontaktzone Dammbaukörper/Wirtsgestein mit der Druckbeaufschlagung begonnen. Für den GV2 wurden die technologischen Untersuchungen für die Herstellung großer MgO-Spritzbetonkörper abgeschlossen. Für den GV 3 sind in Auswertung aller Daten, nach dessen Rückbau, die Ursachen für das Versagen des „Druck- und Wärmeelementes“ bekannt.

Die Untersuchungen zum geochemischen Vorbauerelement befinden sich noch in der Auswertungsphase.

Die weiteren Arbeiten erweisen sich als umfangreicher (2 zusätzliche Großversuche und 2 mittelmaßstäbliche In-situ-Versuche) als anfänglich gedacht. Das trifft sowohl für die wissenschaftlichen Inhalte als auch für die versuchstechnischen Aufwendungen zu.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Bzgl. der Schutzrechtssituation wurde 1 Patent erteilt und 2 weitere Patentanmeldungen wurden getätigt. Weitere 5 schriftliche Publikationen und Vorträge wurden erarbeitet und präsentiert. Von besonderer Bedeutung ist eine Publikation über geochemische Fragestellungen zur Langzeitsicherheit von MgO-Beton. In dieser Publikation wurden Forschungsdefizite aufgezeigt.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 C 1244
Vorhabensbezeichnung: Prognose der Redoxeigenschaften natürlicher wässriger Lösungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2005 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 748.135,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hagemann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die sichere Prognose der Redoxeigenschaften ist eine wesentliche Voraussetzung zur Vor- ausberechnung der im Falle eines hydrologischen Störfalles zu erwartenden Schwermetall- und Radionuklidkonzentrationen im Nah- und Fernfeld einer untertägigen Entsorgungseinrichtung. Ziel des Vorhabens ist es Methoden zu entwickeln, mit denen sich die Redoxeigenschaften insbesondere salinärer Lösungen verlässlich messen und auch voraussagen lassen. Hierzu werden zum einen analytische Methoden entwickelt, zum anderen aufbauend auf experimentellen Untersuchungen ein Modell zur Voraussage der Speziation von Eisen in salinaren Lösungen und zur Löslichkeit eisenhaltiger Festphasen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Entwicklung eines verlässlichen Messverfahrens zur Bestimmung des Redoxpotentials salinärer Lösungen
- Entwicklung eines Verfahrens zur Messung von Wasserstoffkonzentrationen in salinaren Mischlösungen
- Verfahrensvalidierung
- Bestimmung der Speziation von Eisen(II) und Eisen(III) in salinaren Lösungen
- Untersuchung der thermodynamische Stabilität eisenhaltiger Minerale

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Bei der Bestimmung des Zusammenhanges zwischen „scheinbarem pH-Wert“ und der tatsächlichen Wasserstoffionenkonzentration wurden die noch fehlenden ternären chloridischen Systeme NaCl-CaCl₂-H₂O, KCl-CaCl₂-H₂O und MgCl₂-CaCl₂-H₂O, vermessen.

Zur Untersuchung der verlässlichen Redoxmessung in salinaren Systemen wurde die Veränderung des Eh-Wertes bei variierendem Fe(II)/Fe(III)-Verhältnis und konstantem pH untersucht. Die Hintergrundsalzkonzentration betrug 0,01 m NaCl (2 Messreihen) bzw. 5,6 mol/kg NaCl (3 Messreihen). Die Messergebnisse zeigen eine asymptotische Abnahme des Eh-Wertes mit Zunahme des Fe(II)/Fe(III)-Verhältnisses von etwa 600 mV auf 480 mV (hochsalinärer Lösung) bzw. von 550 mV auf 430 mV (in ca. 0,01 m NaCl Hintergrundkonzentration). Weiterhin wurde die Variation der Fe_{ges}-Konzentration bei gleichem Fe(II)/Fe(III)-Verhältnis in hochsalinärer NaCl-Lösung untersucht. Die Veränderung der Fe_{ges}-Konzentration zeigte erwartungsgemäß keine Auswirkung auf den gemessenen Eh-Wert.

Die Variation der H⁺-Konzentration in hochsalinärer NaCl-Lösung bei konstantem Fe_{ges}-Konzentration und konstantem Fe(II)/Fe(III)-Verhältnis wurde in 3 Wiederholungen für den Bereich von 0,12 bis 51,7 mmol/l H⁺ (entspricht pCH = 3,906 bis 1,286) durchgeführt.

Für die Entwicklung eines Verfahrens zur UV-Spektroskopischen Messung von Fe(II)- und Fe(III)-Konzentrationen in salinaren Lösungen im subnanomolar-Bereich wurde festgestellt, dass die Verwendung von Phenanthrolin als Nachweis für FeII keiner Beeinflussung durch hohe MgCl₂ und Na₂SO₄-Konzentrationen sowie einer CaCl₂ -Konzentration bis 1 mol/kg unterliegt. Beim Thiocyanat-Nachweis von FeIII konnte bei einer Erhöhung der Thiocyanatkonzentration eine Beeinflussung durch hochkonzentrierte NaCl-, MgCl₂ und CaCl₂-Lösungen (CaCl₂ Konzentration bis 1 mol/kg) ausgeschlossen werden. Bei Na₂SO₄ hingegen wurde eine Abhängigkeit der Detektion der Fe(III)-Konzentration von Hintergrundsalzkonzentration festgestellt. Weitere Probleme mit dem Kapillar-UV-Spektrometer verhinderten die Aufnahme der anstehenden Vergleichsmessungen im subnanomolaren Bereich.

Für die Untersuchung der thermodynamischen Stabilität eisenhaltiger Minerale wurde eine Literaturübersicht für bereits vorhandene thermodynamische Daten eisenhaltiger Oxide, Hydroxide, basische Chloride, basische Sulfate und Carbonate bei 25 °C erstellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Modellbildung für die Abhängigkeit der Messspannung bei pH-Einstab-Elektroden von der Hintergrundsalzkonzentration bei ternären sulfatischen Systemen und komplexen chloridisch-sulfatischen Systemen.
- Weiterführung der Redoxmessungen in salinaren sulfatischen Lösungen.
- Weiterentwicklung eines Verfahrens zur Messung von Fe(II)- und Fe(III)-Konzentrationen im Subnanomolar-Bereich mit der Kapillar-UV-Spektrometrie.
- Entwicklung eines Speziationsmodells für Fe(II) und Fe(III) sowie Datenauswertung zu eisenhaltigen Festphasen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 C 1254
Vorhabensbezeichnung: Geochemische Barriereeffizienz im anaeroben Deponienahfeld einer UTD		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2005 bis 31.03.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 31.03.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 664.920,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brassler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen der Stilllegung einer Untertagedeponie müssen Maßnahmen durchgeführt werden, die einen sicheren Abschluss der abgelagerten Abfälle vom Biozyklus gewährleisten. Unterschiedliche Barriersysteme können aufgrund ihrer hydraulisch-chemischen Eigenschaften wesentliche Beiträge zur Schadstoffrückhaltung leisten. Laboruntersuchungen sollen den Einfluss der Umgebungsbedingung (anaerob/aerob) auf die Oxidationsspeziationen redoxsensitiver Elemente bestimmen. Dazu ist vorgesehen, die geochemischen Gleichgewichte zu identifizieren, welche die Konzentrationen der Schwermetalle unter anaeroben Bedingungen bestimmen, und welche redoxpuffernden Zuschlagstoffe zur Fixierung von Schwermetallen beitragen können. So soll der Schwermetallgehalt von eluierten Abfallproben (anaerob) identifizierten redoxsensitiven Phasen zugeordnet werden. Untersuchungen, welche die Reaktionsmechanismen von Schwermetallen unter anaeroben UTD-Bedingungen aufklären können, stellen eine wesentliche Grundlage zur Beurteilung der Mobilität von schädlichen Abfallinhaltsstoffen dar, aus denen sich technische Maßnahmen zur Verbesserung der Langzeitsicherheit untertägiger Deponiesysteme ableiten lassen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Übersichts-Screening

AP2: Detailuntersuchungen ausgewählter Systeme mit Analyse von Reaktionsmechanismen

AP3: Ableitung redoxpuffernder Zuschlagstoffe

AP4: Begleitende geochemische Modellierung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Abschluss der Batchversuche an natürlichen und synthetischen Abfällen unter aeroben und anaeroben Versuchsbedingungen sowie unter Berücksichtigung unterschiedlicher Kornfraktionen, unterschiedlicher Batchzeiten und unterschiedlicher Basislösungen.
- Weiterführende Probenbearbeitung und Messungen der Lösungen (Hauptelemente sowie Neben- und Redox-sensitive Elemente) mittels nasschemischer Analytik sowie der Rückstände aus den Batchversuchen mittels Laserablationsanalytik (Herstellung von Presstabletten), graphische Auswertung der Messergebnisse.
- Laserablationsanalytik an Originalabfällen und den Rückständen aus Batchversuchen (aerob/anaerob) unter Berücksichtigung unterschiedlicher Kornfraktionen.
- Zusammenfassen der Arbeiten und Literaturrecherchen in Form eines abschließenden Berichtes.
- Die Elemente wurden der Zusammensetzung der Abfallproben entsprechend angereichert. Die Anreicherung war je nach Basislösung unterschiedlich. Die höchsten Gehalte der Elemente wurden in IP9-Lösung nachgewiesen.
- Auch nach Homogenisierung von Abfallproben bleibt die Probenentnahme von geringen Mengen eine Stichprobe. Hierin werden die teilweise abweichenden Elementkonzentrationen in Eluaten und in den Ausgangsanalysen der Abfälle begründet.
- Aufgrund der Problematik (Verunreinigung des gesamten Messsystems) bei einem Wechsel zwischen Nass- und Laseranalytik an einem ICP-MS wird empfohlen, zwei unterschiedliche Gerätesätze aus Sampler und Skimmer zu verwenden, die vor der entsprechenden Analyse ausgetauscht werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung des Abschlussberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 C 1264
Vorhabensbezeichnung: Beweissicherungsprogramm zum geomechanischen Verhalten von Salinarbarrieren nach starker dynamischer Beanspruchung und Entwicklung einer Dimensionierungsrichtlinie zum dauerhaften Einschluss		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2005 bis 30.04.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.04.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 627.883,00 EUR	Projektleiter: Dr. Minkley	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit Auffahrung einer Wetterstrecke über dem Gebirgsschlagfeld von 1996 in der Grube Teutschenthal sind die Voraussetzungen für Untersuchungen der Schädigungsauswirkungen in der das Bruchfeld umgebenden hangenden Salinarbarriere gegeben. Neben den experimentellen In-situ- und Laboruntersuchungen sind Arbeiten zur Vervollständigung der Schädigungsmechanik und gebirgsmechanische Berechnungen zur Dimensionierung von Salinarbarrieren vorgesehen. Im Ergebnis des Beweissicherungsprogramms lässt sich eine Sicherheit gegenüber einem Integritäts- und Dichtheitsverlust von Salinarbarrieren ausweisen, die letztendlich auf Versuchen im Maßstab 1:1 unter extremen dynamischen Beanspruchungen basiert, die um ein Vielfaches höher sind als quasi statische Beanspruchungen. Die Forschungsergebnisse sollen zu einer Dimensionierungsrichtlinie für Salinarbarrieren zur Gewährleistung eines dauerhaften, dichten Einschlusses unter den anthropogenen und geogenen Randbedingungen in der flachen und steilen Lagerung führen und somit für eine praktische Umsetzung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen zur Verfügung stehen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Vervollständigung der Schädigungsmechanik
- AP2: In-situ-Untersuchungen zu den Schädigungsauswirkungen in der Salinarbarriere nach starker dynamischer Beanspruchung
- AP3: Laboruntersuchungen zu den Schädigungsauswirkungen an gewonnenen Bohrkernproben aus der dynamisch beanspruchten Salinarbarriere
- AP4: Geomechanische Berechnungen zur Dimensionierung von Salinarbarrieren für ein Endlager in der flachen und steilen Lagerung
- AP5: Entwicklung einer Dimensionierungsrichtlinie für die erforderliche Mächtigkeit von Salinarbarrieren zur Erlangung des dauerhaften Einschlusses
- AP6: Erarbeitung des Abschlussberichtes und Dokumentation der Ergebnisse.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Abschließende vergleichende Berechnungen mit dem lokalen und nicht lokalen visko-elasto-plastischen Stoffmodell.
- AP2: Auswertung der gemessenen Druckabfallkurve der 2. Langzeit-Permeabilitätsmessstelle über dem Bruchfeld mit numerischer Simulation des Abströmverhaltens. Die Auswertung liefert Permeabilitäten wie im unverritzten, nicht dynamisch beanspruchten Steinsalz.
- AP4: Abschließende Berechnungen mit den gebirgsmechanischen Modellen für ein Endlager in der steilen und flachen Lagerung unter Einbeziehung der Bohrlochlagerung.
- AP5: Ableitung erforderlicher Mächtigkeiten von Salinarbarrieren zur Erlangung des dauerhaften Einschlusses.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP6: Erarbeitung des Abschlussberichtes und Dokumentation der Ergebnisse.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- MINKLEY, W. (2008): Integrationsverhalten von Salinarbarrieren. FZK- PTKA, WTE
8. Projektgespräch 06./07. Mai 2008, Wissenschaftliche Berichte

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1275
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt TUC: Gekoppelte Modellierung des C:HM Verhaltens von selbstverheilendem Salzversatz		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2005 bis 31.03.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 31.03.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 257.176,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Dieses Verbundprojekt verfolgt das Ziel, Programme für das HM-Verhalten von Salz und Bentonit (*FLAC3D* und *GeoSys/RockFlow*) mit geochemischen Modellberechnungen (*CHEMAPP* über *EQLink*) zu koppeln und Ergebnisse von gekoppelten Berechnungen anhand geeigneter Laborversuche an Vollprüfkörpern und an axial-gelochten Großbohrkernen zu testen. Das Forschungsprojekt ist ein gemeinsames Vorhaben der GRS sowie der Universitäten Clausthal und Tübingen. Als Endergebnis des Teilprojektes wird ein numerisches Modell zur Untersuchung von Abschlussbauwerken mit SVV als Dichtelement mit Berücksichtigung der C:HM-Kopplung sowie der Wechselwirkungen zwischen Auflockerungszonen und Abschlussbauwerken zur Verfügung stehen. Ferner wird durch die enge Zusammenarbeit in einer gemeinsamen Programmentwicklung eine langfristige wissenschaftliche Kooperation angestrebt. Die numerischen Algorithmen für die Modellierung mechanischer Prozesse in tonigen und salinaren Medien sind methodisch sehr ähnlich. Daher ist ein weiteres Ziel dieses Teilprojektes eine Vereinheitlichung der Methoden zur Simulation inelastischer Deformationsprozesse in chemisch reaktiven Systemen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP0a: Aufbau einer Anlage zur Herstellung von mehreren Prüfkörpern gleichzeitig nach Rezeptur von GRS und Optimierung des Herstellungsprozesses
- AP0b: Kurzzeitversuche an ausgehärteten SVV - Vollprüfkörpern von GRS und von TUC nach Rezeptur von GRS
- AP0c: Entwicklung eines neuen Verfahrens, um Prüfkörper mit besser reproduzierbarer Qualität herzustellen
- AP0d: Herstellung der für die Versuche benötigten Prüfkörper
- AP1: Kurzzeitversuche an ausgehärteten SVV - Vollprüfkörpern
- AP2: Kompressionsversuche unter isostatischen Dauerbelastungen
- AP3: Kriechversuche bei einem konstanten Manteldruck
- AP3a: Untersuchung der Gas- und NaCl - Lösungspermeabilität
- AP3b: Untersuchung des Materialverhaltens im Bezug auf Homogenität, Schädigung und Verheilung durch Röntgentomografie
- AP4: Entwicklung eines neuen Stoffmodells für SVV zur Beschreibung des langfristigen Kompaktions- und Kriechverhaltens des SVV nach dem Aushärtungsprozess
- AP5: Modellentwicklung zur Beschreibung der Änderung von Porositäten und Permeabilitäten infolge mechanischer Kompaktion nach dem Aushärtungsprozess
- AP6: Implementierung des zu entwickelnden Stoffmodells für SVV in *FLAC3D*
- AP7: Implementierung der zu entwickelnden Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für SVV in *FLAC3D*
- AP8: Implementierung der Schnittstelle zwischen *FLAC3D* und *CHEMAPP* über *EQLink* (abgearbeitet)
- AP9: Mechanisch – hydraulische Modellierung der Versuche von GRS an gelochten Großbohrkernen.
- AP10: Erste Untersuchungen zur Verwendung des SVV zur Verwendung als Versatzmaterial / Verschlussmaterial im Konzept der Bohrlochlagerung
- AP11: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Untersuchungen zum Kriechverhalten sind mit 3 triaxialen Kriechversuchen abgeschlossen worden. Bei diesen Kriechversuchen hat sich gezeigt, dass der SVV sich sehr stark kompaktiert und die den Kriechversuchen vorgelagerte Kompaktionsphase mit einer Dauer von 5 Tagen nicht ausreichend war, um die Prüfkörper in hinreichendem Maße zu kompaktieren. Die Dauer der Laststufen mit knapp 40 Tagen war ebenfalls nicht ausreichend, um stationäre Verhältnisse zu erreichen. Insgesamt zeigen die Kriechversuche, dass das zeitabhängige Verhalten des SVV in erster Linie durch Kompaktion bestimmt wird und somit die elastische Kompression und das Kriechen eher untergeordnete Bedeutungen haben.

Die Simulationen zum Tragsystem einer Strecke mit in Streckensohle angeordnetem vertikalem Bohrloch das mit SVV verfüllt ist sind abgeschlossen worden. Hierbei ist eine Verfüllung mit Salzgrus, angemischtem SVV und aufgesättigtem SVV mit und ohne Kristallisationsdruck untersucht worden. Bei den Simulationen mit aufgesättigtem SVV ist von der Hypothese ausgegangen worden, dass der aufgesättigte SVV im größeren Maßstab ein homogeneres Materialverhalten aufweist als im Labor und das Material einen relativ steifen Verschluss formt, dessen Verhalten näherungsweise elastisch modelliert werden kann.

Als Ergebnis dieser Berechnungen kann festgehalten werden, dass bei Verfüllung des Bohrlochbereiches unterhalb der Zugangsstrecke mit einem relativ steifen nicht viskosen Material wie dem aufgesättigtem SVV durch die Konvergenz der Strecke ein Verschiebungsgradient zwischen Versatzmaterial und umgebendem Steinsalzgebirge parallel zur Bohrlochachse auftritt, der zu signifikanten Zugspannungen im Verschlussmaterial führt. Diese Zugspannungen behindern die Rückbildung der Auflockerungszone zwar nur in geringem Maße, in der Praxis wird jedoch ein Materialversagen des Verfüllmaterials parallel zur Bohrlochachse durch Zugspannungsbedingte Trennbrüche wahrscheinlich. Dieser Bereich des mit SVV versetzten Bohrlochs kann nicht als Verschluss angesehen werden.

Ein integral angesetzter Kristallisationsdruck von $P_k = 5 \text{ MPa}$ führt entsprechend den Berechnungsergebnissen nur zu unwesentlichen Veränderungen in den längerfristigen zeitlichen und räumlichen Entwicklungen der Spannungen, Verschiebungen und der Dilatanz. Ursächlich für die überraschend geringen Auswirkungen des Kristallisationsdruckes ist zum Einen, dass das Bohrloch durch den Kristallisationsdruck aufgeweitet wird und durch die damit verbundene Volumenvergrößerung des Bohrlochs der Kristallisationsdruck eigentlich herabgesetzt wird (Verbundsystem Gebirge - SVV) und zum Anderen, dass die sich aufbauenden Gebirgsspannungen bei dem bereits von Anfang an steifen Material (aufgesättigter SVV) schon nach Monaten größer sind als der Kristallisationsdruck. Daraus folgt, dass mit dem einfachen Verbundmodell Gebirge-SVV und dem als Randlast auf die Bohrlochkontur angesetzten Kristallisationsdruck das tatsächliche Geschehen nur unzureichend abgebildet wird. Erforderlich ist ein physikalisches Modell, das den Kristallisationsdruckentwicklungsprozess in Abhängigkeit auch von einem während des Kristallisationsprozesses veränderlichen Volumen beschreibt (bisher Versuche in Stahlzellen => konstantes Volumen).

Im Bezug auf das umgebende Steinsalzgebirge kann aus den Berechnungen abgeleitet werden, dass für den gewünschten Effekt einer schnelleren Rückbildung der Auflockerungszone zumindest ein deutlich höherer Kristallisationsdruck angesetzt werden müsste, z. B. $P_k = 15 \text{ MPa}$. Zusätzlich sollte gewährleistet werden, dass das Versatzmaterial Materialeigenschaften aufweist, die ein Auftreten von Zugspannungen im Versatz verhindern.

Zugspannungen im Versatzmaterial treten bei Salzgrus und angemischtem SVV nicht auf, da beide Materialien deutlich verformbarer und damit weniger steif sind als der aufgesättigte SVV. Die Berechnungen zeigen im Fall des Salzgruses, dass ein Verschluss mit diesem Material prinzipiell machbar ist, doch bis zum Erreichen eines dichten Verschlusses in der Größenordnung 100 Jahre Kompaktionszeit erforderlich werden, wenn nicht die Kompaktion des Salzgruses z. B. durch eine erhöhte Gebirgstemperatur oder bautechnische Maßnahmen wie Anfeuchten des Salzgruses begünstigt wird.

Als am Besten geeignet erweist sich der angemischte SVV, da er bereits direkt nach der Verfüllung einen sehr dichten Verschluss gewährleistet und dennoch so verformbar ist, dass die Kriechbewegungen des umgebenden Steinsalzgebirges in der Streckensohle zu keinen Zugspannungen im Versatzmaterial führen. In diesem Fall ist zu überlegen, ab welcher Bohrlochteufe das Versatzmaterial der Anforderung an ein Verschlussmaterial genügt. Zusätzlich benötigt der angemischte SVV keine erhöhte Gebirgstemperatur, um bereits frühzeitig einen dichten Verschluss zu gewährleisten. Er erscheint somit besonders für den Einsatz in Untertagedeponien ohne wärmeentwickelnde Abfälle geeignet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Ende März ist ein Entwurf des Abschlussberichtes beim Projektträger eingereicht worden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 C 1285
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt GRS: Laborversuche und Geochemische Modellierung		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2005 bis 31.03.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 31.03.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 602.439,00 EUR	Projektleiter: Dr. Moog	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die aktuell in der Entwicklung befindlichen Programme für die Modellierung hydraulischer und mechanischer Prozesse in Salz-/Bentonit-Barrieren MISES III (TUC) und Geo-Sys/RockFlow (ZAG) sollen mit thermodynamischen Gleichgewichtsrechnungen gekoppelt und anhand geeigneter experimenteller Untersuchungen getestet werden (C:HM-Modellierung).

Dieses Teilprojekt:

- Gewinnung von Messdaten für die Überprüfung von Modellergebnissen der Programme MISES III und ROCKFLOW
- Anpassen der Schnittstelle EQLINK an die Erfordernisse von MISES III und ROCKFLOW

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Salz

- AP1.1: Stahlrohr: SVV+Q-Lauge/NaCl-Lösung
- AP1.2: Bohrkern: SVV+Q-Lauge
- AP1.3: Probenherstellung für TUC

AP2: Bentonit

- AP2.1: Einfluss der Ionenstärke
- AP2.2: Einfluss des pHs
- AP2.3: Einfluss des Ionenaustausches $\text{Na} < - > \text{Ca}$
- AP2.4: Einfluss von Ausfällungen im Porenraum

AP3: EQLINK

- AP3.1: Anpassung an MISES III und ROCKFLOW
- AP3.2: Modellierung des Ionenaustausches
- AP3.3: Auswertung von Rechenläufen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Verfassen des Abschlussberichtes.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Eberhard-Karls-Universität Tübingen, Wilhelmstr. 7, 72074 Tübingen		Förderkennzeichen: 02 C 1295
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt Uni Tübingen: Validierung Numerischer Modelle für geochemische Prozesse in geotechnischen Dichteelementen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2005 bis 31.03.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 31.03.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 233.598,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kolditz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundvorhabens ist es, das open source Programmsystem GeoSys/RockFlow für die Modellierung hydraulischer und mechanischer Prozesse in Salz-/Bentonit-Barrieren mit thermodynamischen Gleichgewichtsrechnungen zu koppeln und anhand geeigneter experimenteller Untersuchungen zu testen (C:HM-Modellierung).

Dieses Teilprojekt wird sich schwerpunktmäßig mit geochemischen Reaktionen in tonartigen Materialien als auch salinaren Wirtsgesteinen beschäftigen. Insbesondere geht es um die Einwirkung chemischer Prozesse auf hydro-mechanische Phänomene, wie z. B. Alterationen des Porenraums und damit einhergehende Veränderungen hydraulischer Eigenschaften. Die Kopplung chemischer mit hydro-mechanischen Prozessen soll durch die programmtechnische Verknüpfung der Codes ChemApp und GeoSys/RockFlow (GS/RF) erfolgen. Alternativ wird eine Schnittstelle zum geochemischen Simulator GEMS (Paul-Scherrer-Institut, Schweiz) entwickelt. Durch diese Programmschnittstellen kann zum einen die Expertise beider Gruppen auf den Gebieten Geochemie (Braunschweig) und Hydromechanik (Leipzig) zusammengeführt werden. Ferner wird durch die enge Zusammenarbeit in einer gemeinsamen Programmentwicklung eine langfristige wissenschaftliche Kooperation angepeilt. Die numerischen Algorithmen für die Modellierung mechanischer Prozesse in tonigen und salinaren Gesteinen sind methodisch sehr ähnlich, daher ist die zweite Zielstellung dieses Teilprojektes eine Vereinheitlichung der Methoden zur Simulation inelastischer, zeitabhängiger Deformationsprozesse in chemisch reaktiven Systemen (Zusammenarbeit mit TUC).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm besteht aus drei aufeinander aufbauenden Arbeitspaketen:

- AP1: Modellentwicklung
- AP2: Softwareentwicklung
- AP3: Modellanwendung auf experimentelle Daten der Projektpartner (Modellvalidierung)
- AP4: abschließende gemeinsame Veröffentlichung der wichtigsten Projektergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Nach Abschluss der programmtechnischen Realisierung von Schnittstellen zwischen OpenGeoSys und unterschiedlichen geochemischen Simulatoren (PHREEQC, ChemApp, GEMS) wurden in der vorangegangenen Förderperiode Anwendungsbeispiele für komplexe geochemische Systeme, wie nicht-ideale Solid-Solutions in Konkurrenz mit Ionen-Austausch-Reaktionen erarbeitet (Shao et al. 2009a,b). Dabei stand die Bewertung des Retardationspotentials von Bentonite-Buffern im Mittelpunkt. In der abschließenden Projektphase konnte am Beispiel zum reaktiven Transport von Magnesiumchloridlösung durch ein mit Kalzit angereichertes eindimensionales Gebiet die Übereinstimmung der Ergebnisse für alle realisierten C:HM-Schnittstellen gezeigt werden. An einem Literaturbeispiel wurde zudem das Potenzial der entwickelten gekoppelten Modelle und der Software verdeutlicht, den Einfluss chemisch induzierter Porositätsänderungen auf hydraulische und mechanische Prozesse zu simulieren. Die Kopplung wird in diesem Zusammenhang über eine geeignete Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung hergestellt (Shao et al. 2009c).

Auf dem Gebiet der geomechanischen Modellierung wurde zusätzlich zu existenten Ansätzen ein nichtlinear-elastisches Materialmodell entwickelt und in OpenGeoSys implementiert (Görke et al. 2009). Es basiert auf einer Modifikation des an der TU Clausthal-Zellerfeld entwickelten Lubbyl-Ansatzes und gewährleistet eine quantitativ deutlich verbesserte Simulation triaxialer Versuche an Proben aus Salz bzw. SVV. Das betrifft sowohl den Kurzzeit- als auch den Langzeitbereich mit transienten und stationären Anteilen der Kriechdeformation. Zur Verifizierung der Modelle einschließlich ihrer numerischer Realisierung sowie der stetigen Qualitätskontrolle wurde im Verlaufe des gesamten Vorhabens die Benchmarksammlung für die relevanten chemischen, hydraulischen und mechanischen Prozesse sowie deren wechselseitiger Kopplung kontinuierlich erweitert (Kolditz und Shao 2009). Für die Programmentwicklung und die Dokumentation des Bearbeitungsfortschritts hat sich der Einsatz eines Trac/Wiki/Subversion Projektmanagementsystems bewährt (www.opengeosys.net).

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Projektarbeiten wurden planmäßig zum 31. März 2009 beendet. Gegenwärtig erfolgt die Erstellung der Endfassung des Abschlussberichtes, der fristgemäß vorgelegt wird. Zwischen den Projektpartnern wurden diverse Konzepte zur Publikation der Forschungsergebnisse in internationalen Fachzeitschriften abgestimmt. Zudem ist nach Abgabe des Abschlussberichtes eine Detaildiskussion über mögliche Anschlussaktivitäten geplant, die sich aus offen gebliebenen bzw. im Zuge der Bearbeitung des Forschungsthemas neu entstandenen Fragestellungen ergeben. Fachliche Ansatzpunkte dazu sind einschließlich methodischer Lösungsvorschläge in der Zusammenfassung des Abschlussberichtes formuliert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Goerke U-J, Wang W, Kolditz O (2009): Preparation and implementation of the Hou/Lux material model for complex rate dependent material behaviour of rock salt, UFZ, Technical Report.

Kolditz O and Shao H (Eds) (2009): OpenGeoSys – Developer Benchmark Book. V4.10, Helmholtz Centre for Environmental Research (UFZ) and Federal Institute for Geosciences and Natural Resources (BGR), Online Documentation, www.opengeosys.net.

Shao H, Dmytrieva S, Kolditz O, Kulik DA, Kosakowski G (2009a): Modeling reactive transport in non-ideal aqueous - solid solution system. *Applied Geochemistry*, 24(7):1287-1300.

Shao H, Dmitrii A. Kulik, Urs Berner, Georg Kosakowski and Olaf Kolditz (2009b): The impact of competition between solid solution formation and cation exchange on the retardation of aqueous radium, *Geochemical Journal*, submitted.

Shao H, Kosakowski G, Kulik DA, Kolditz O (2009c): Modeling effects of different chemical mechanisms on the retardation of radio nuclides in the near field of a radioactive waste repository. Model-Care2009, 7th International Conference on Calibration and Reliability in Groundwater Modeling “Managing Groundwater and the Environment”, Wuhan, China.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 C 1335
Vorhabensbezeichnung: Qualifizierung von Strömungsbarrieren in Salzformationen, Phase 1 bis Phase 4	
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche	
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2005 bis 28.02.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.430.864,00 EUR	Projektleiter: Dr. Herbert

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Bisherige Entwicklungen von geotechnischen Barrieren für ein Endlager oder eine Untertage-deponie in Salzformationen zeigten nur zum Teil Erfolg versprechende Resultate. Langzeit-stabile Barrieren, die auf arteigenes Material des Wirtsgesteins Salz zurückgreifen, wurden bisher nicht systematisch entwickelt oder getestet. Insbesondere bei Vorhandensein von leichtlöslichen Mineralen im Wirtsgestein, wie Carnallit oder Tachhydrit, stehen derzeit keine adäquaten Konzepte zur Verfügung.

Mit den chemisch und mineralogisch verwandten Materialien Selbstverheilender Versatz (SVV) und AISKRISTALL wurden in den vergangenen Jahren zwei Erfolg versprechende Werkstoffe entwickelt, die bereits im Labor oder im Technikum ihre jeweilige Einsatzfähigkeit als Barrierematerial zeigten. Das Zusammenwirken beider Werkstoffe und die Zuordnung von im wesentlichen Dicht- und Tragfunktion ist bisher jedoch nicht untersucht worden. Dies soll Gegenstand des vorliegenden Projektes sein. Dabei wird das generelle Ziel verfolgt, die Materialien soweit zu qualifizieren, dass sie denselben Entwicklungsstand haben wie bisher untersuchte Barrierematerialien (z. B. Salzbeton oder Bentonit).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung eines technischen Nachweiskonzeptes und Planung von Experimenten im Labor, im Technikum und in situ
- AP2: Vorversuche im Labor und Technikum sowie Nachweis der technischen Realisierbarkeit
- AP3: Durchführung und Auswertung von Verifikationsexperimenten
- AP4: Dokumentation der Ergebnisse und Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten für den großkalibrigen In-situ-Versuch in einem horizontalen Bohrloch mit dem Durchmesser von ca. 1,2 m im Carnallitit-Tachydrit-Salzgestein im Bergwerk Teutschenthal aufgenommen. Alle erforderlichen Bohrarbeiten sind erfolgreich abgeschlossen. Gleiches gilt für die Instrumentierung des Versuchs. Alle Messfühler wurden beschafft getestet und eingebaut. Die Messwerterfassung wurde beschafft und vor Ort installiert. Mit der Verfüllung des Bohrlochs mit SVV wurde begonnen. Die erforderlichen 3m³ tachydritgesättigter Lösung für die Flutung des SVV wurden im Labor in Braunschweig hergestellt. Die In-situ-Arbeiten haben sich als sehr zeitintensiv herausgestellt. Der Zeitbedarf ist um bis zu 30 % höher als geplant. Die Arbeiten kommen jedoch gut voran. Bisher haben sich keine größeren Schwierigkeiten ergeben.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die In-situ-Arbeiten werden fortgesetzt. Noch zu realisieren ist der Anschluss der Messfühler an die Messwerterfassung und der Test der gesamten Anlage. Danach erfolgt der Bau des Widerlagers und letztendlich die Flutung des SVV. Mit diesen Arbeiten sind alle Baumaßnahmen abgeschlossen und es beginnt die Phase der Reaktion des SVV mit der Lösung und die automatisierte Registrierung der Messwerte und deren Auswertung. Die Messungen können vom Rechner in Braunschweig eingesehen werden. Die Entwicklung des Verschlussystems ist somit unter ständiger zeitnaher Kontrolle. Mit der Flutung wird nach derzeitigem Stand der Arbeiten in der zweiten Augsthälfte begonnen werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Eine ausführliche Präsentation der bisherigen Arbeiten und Ergebnisse zu den SVV-Arbeiten wurde vorbereitet und wird am 02.07.2009 in Teutschenthal dem CARLA-Konsortium und dem Projektträger vorgestellt.

Herbert, H.-J (2009): Verschlussbauwerke aus SVV - Projektgespräch "CARLA" am 02.07.2009 am Schacht Halle/Angersdorf

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1355
Vorhabensbezeichnung: Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des druckbetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht permeables Barrieren-Gebirge (Salinar)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2005 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 581.000,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen von Standortvergleichen und standortbezogenen Sicherheitsanalysen müssen die Änderungen von Tragverhalten und langzeitsicherer Abdichtungsfunktion der Barrierengesteinsformation Salzgestein, welche bei einer druckgetriebenen Infiltration von fluiden Medien in das ein Endlager umgebende Salinargebirge zu erwarten sind, qualitativ und quantitativ beschrieben werden können. Dazu sind als Grundlage die zur Infiltration führenden und die davon beeinflussten Prozesse zu identifizieren und zu beschreiben (physikalische Modellierung). Des Weiteren muss ein Instrumentarium erarbeitet werden, mit dessen Hilfe das Tragverhalten und die Funktionsfähigkeit von Gebirge (sowohl als Tragelement wie auch als geologische Barriere) und geotechnischen Barrieren (als Verbundkonstruktionen von umgebendem Gebirge und bautechnischen Abdichtungs- / Tragelementen) analysiert und mit hinreichend zuverlässiger Sicherheit prognostiziert werden können.

Es ist daher Ziel des Vorhabens, unter Nutzung und durch zusätzliche Erweiterung bestehender Software, das vom Antragsteller entwickelte Infiltrationsmodell nach *Lux* mit den notwendigen Modifikationen auf verschiedene Fluide als Infiltrationsmedium zu übertragen und anzuwenden. Aufbauend auf abgesicherten laborativen Erkenntnissen soll herausgearbeitet werden, welche Erweiterungen zukünftig erforderlich sind, um das vorhandene Infiltrationsmodell auch auf Gase als Infiltrationsmedium anwenden zu können.

Die Validierung des Infiltrationsmodells erfolgt in einem ersten Schritt durch die Simulation von Laborversuchen (back-analysis). Durch die Anwendung auf ein exemplarisches Grubensystem ist eine weitere Validierung des Infiltrationsmodells beabsichtigt (Plausibilitätsanalyse).

Das beantragte Vorhaben trägt dazu bei, die Prädiktionsqualität der für eine Prognose des Langzeitverhaltens und der Barrierenintegrität erforderlichen Nachweise zu erhöhen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Infiltrationsversuche an Salzprüfkörpern mit unterschiedlichen Fluiden

AP2: Infiltrationsversuche an Salzprüfkörpern aus verschiedenen Lokationen

AP3: Anpassung / Erweiterung des vorhandenen Infiltrationsmodells (Infiltrationsraten- / Infiltrationsmengenmodell)

AP4a: Implementierung des erweiterten Infiltrationsmodells und Kopplung an das FEM-Programm MISES3

- AP4b: Implementierung des erweiterten Infiltrationsmodells und Kopplung an das FDM-Programm FLAC3D
- AP5: Versuche an vollständig oder teilweise axial gelochten Prüfkörpern
- AP6: Validierung der rechnerischen Simulation des Infiltrationsprozesses anhand laborativer Untersuchungen an speziellen Prüfkörpern
- AP7: Demonstration der Wirkungsweise der Simulationssoftware INFIL anhand von exemplarischen Beispielen
- AP8: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Infiltrationsversuche mit Tracer-Flüssigkeit und Gas wurden durchgeführt.
- AP2: Infiltrationsversuche mit Tracer-Flüssigkeit bei einem signifikant höheren Druckniveau werden weiterhin durchgeführt. Des Weiteren sind die Infiltrationsversuche an Salzprüfkörpern aus einer weiteren Lokation fortgesetzt worden.
- AP3: Im Berichtszeitraum wurde der Modellierungsansatz zur Infiltration von Fluiden in ein Salinargebirge nicht weiter modifiziert. Die Implementierung des bisherigen Ansatzes wurde bereits abgeschlossen und an Beispielrechnungen validiert.
- AP4: Die Implementierung des Modellierungsansatzes wurde abgeschlossen.
- AP5: Infiltrationsversuche an teilweise axial gelochten Prüfkörpern wurden durchgeführt.
- AP6: Die exemplarische Nachrechnung eines Laborversuchs mit einem teilweise axial gelochten Prüfkörper ist mit Hilfe der Simulationssoftware durchgeführt worden. Die Validierung des Infiltrationsmodells und die numerischen Simulationen anhand von Feldmessdaten sind derzeitiger Projektschwerpunkt.
- AP7: Arbeiten zur Demonstration der Wirkungsweise der Simulationssoftware INFIL an verschiedenen Beispielen sind bereits durchgeführt worden und werden weiterhin durchgeführt.
- AP8: Arbeiten am Abschlussbericht sind aufgenommen worden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1/2: Weiterführung der Infiltrationsversuche bei einem signifikant höheren Druckniveau bis zum Abschluss des Laborversuchsprogramms.
- AP3: Weitere theoretische Ansätze sind zurzeit nicht vorgesehen.
- AP4: Die Implementierung des erweiterten Infiltrationsmodells ist abgeschlossen.
- AP5: Die Versuchsdurchführung an vollständig oder teilweise axial gelochten Prüfkörpern ist abgeschlossen.
- AP6: Weitere Verifikations- und Validierungsberechnungen werden durchgeführt (Bernburg-Testkaverne, Bernburg-Bohrlochfracversuch mit Gas).
- AP7: Weiterführung der Arbeiten an exemplarischen Beispielen.
- AP8: Fertigstellung des Abschlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wolters, R., Lux, K.-H. & Düsterloh, U. (2009): Fluid Infiltration Processes into Rock Salt Barriers resulting from Fluid Pressure Build-Up due to Convergence, Thermal Expansion and Gas Generation. Als Abstract eingereicht für die EC-TIMODAZ-THERESA THMC conference, Vortrag in Vorbereitung.

Zuwendungsempfänger: K-UTEC AG Salt Technologies, Am Petersenschacht 7, 99706 Sondershausen		Förderkennzeichen: 02 C 1395
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 1		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 615.337,00 EUR	Projektleiter: Dr. Heuchel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel des Vorhabens ist die Weiterentwicklung und Optimierung bestehender Magnesiabinder-Systeme für Verschlussbauwerke in Untertage-Deponien und atomaren Endlagern im Salinar unter besonderer Berücksichtigung der Langzeitsicherheit, der Resistenz gegenüber zutretenden Lösungen, der Beherrschung der maximalen Abbinde Temperaturen und der Bereitstellung eines praktikablen Verfahrens.

Das Projekt beginnt mit der Grundlagenuntersuchung an Magnesiabindersystemen zum einen auf Basis von Alkali-Phosphaten (INW) und zum anderen auf Basis von Oxysulfaten (K-UTEC). Erfolgsversprechende Baustoffabstimmungen sollen in Folge umfangreicher Eignungsuntersuchungen im Labor unterzogen werden (INW, IBB). Daran schließen sich Handhabungsversuche zur Einbringung und Verarbeitbarkeit der Baustoffe (K-UTEC, IBB) sowie ein kleintechnischer Versuch im m³ - Bereich an.

Das Vorhaben wird auf der Basis der Zusammenarbeit durch folgende Institutionen bearbeitet:

- Institut für Bergbau, TU Clausthal
- Institut für Nichtmetallische Werkstoffe, TU Clausthal
- K-UTEC AG Salt Technologies – bis 31.12.2007 Kali-Umwelttechnik GmbH (K-UTEC), Sondershausen

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Nach Abschluss der Arbeitspakete 2, 3 und 5 wurden die AP 6 und AP 7 bearbeitet:

- Erprobung eines optimierten Systems in einer kleintechnischen Versuchsanlage
- Erarbeitung des Abschlussberichtes

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Untersuchung der rheologischen Eigenschaften erfolgte mit einer ausgewählten Rezeptur in einem Pumpversuch (Rohrviskosimeter). Dieser Versuch erbrachte die Bestätigung der Verarbeitungszeit, der Sedimentationsstabilität, den Nachweis der Festigkeiten bei einem Scale up auf die 20-fache Probemenge sowie die Ermittlung von rheologischen Kennwerten wie Fließgesetz, Viskosität und Fließgrenze. Mit diesen Kennwerten konnten Vorausberechnungen der Druckverluste für unterschiedliche Rohrgeometrien (unter Berücksichtigung der Rohrreibung) vorgenommen werden.

Der kleintechnische Versuch wurde mit dieser ausgewählten Magnesiabinder-Rezeptur auf Sulfatbasis realisiert, wobei sich die Verarbeitbarkeit auch im größeren Maßstab (2 m³) bestätigte. Nach Erhärten des Probekörpers (ca. 30 Tage nach befüllen) wurde eine Stirnseite mit S-30-Lösung (30 %ige MgCl₂-Lösung) beaufschlagt und nach Konsolidierung des Probekörpers schrittweise druckbeaufschlagt. Über einen Zeitraum von 10 Monaten wurden und werden Drücke, Temperaturen sowie Verformungen an der Versuchseinrichtung an verschiedenen Stellen des Probekörpers registriert und ausgewertet. Dabei zeigte sich, dass der Probekörper Lösung aufnimmt und leicht quillt. Nach der Druckbeaufschlagung – zunächst mit 3 bar, später mit 5 bar – konnte der Druck nicht stabil gehalten werden, was auf eine Phasenumwandlung innerhalb des Probekörpers hinweisen könnte.

Nach Beenden des Versuches wird der Probekörper mittels Kernbohrungen beprobt und die möglichen Strukturveränderungen werden untersucht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Versuchsbetrieb der kleintechnischen Versuchsanlage wird im August 2009 beendet. Danach erfolgt die Beprobung und Untersuchung der Proben.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1405
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 2		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 330.406,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Langefeld	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel des Vorhabens ist die Weiterentwicklung und Optimierung bestehender Magnesiabinder-Systeme für Verschlussbauwerke in Untertage-Deponien und atomaren Endlagern im Salinar unter besonderer Berücksichtigung der Langzeitsicherheit, der Resistenz gegenüber zutretenden Lösungen, der Beherrschung der maximalen Abbinde-temperaturen und der Bereitstellung eines praktikablen Verfahrens.

Das Projekt beginnt mit der Grundlagenuntersuchung an Magnesiabindersystemen zum einen auf Basis von Alkali-Phosphaten (INW) und zum anderen auf Basis von Oxysulfaten (K-UTEK). Erfolgsversprechende Baustoffabstimmungen sollen in Folge umfangreicher Eignungsuntersuchungen im Labor unterzogen werden (INW, IBB). Daran schließen sich Handhabungsversuche zur Einbringung und Verarbeitbarkeit der Baustoffe (K-UTEK, IBB) sowie ein kleintechnischer Versuch im m³ - Bereich an.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagenuntersuchung zur Optimierung der Magnesiabinder-Alkali-Phosphat-Baustoffe (INW)
- AP2: Grundlagenuntersuchung zu dem Magnesiabinder Oxysulfat-System (K-UTEK)
- AP3: Gefügeuntersuchung an den Magnesiabindersystemen auf Phosphat- und Sulfat-Basis (INW)
- AP4: Untersuchungen zu den Eigenschaften der Baustoffe unter geomechanischen Gesichtspunkten (IBB)
- AP5: Handhabungsversuche (IBB, K-UTEK)
- AP6: Erprobung optimierter Systeme in einer kleintechnischen Versuchsanlage analog FuE-Projekt 02C1214 (K-UTEK)
- AP7: Versuchsauswertung, Abschlussberichte, Verwertungskonzept (alle Verbundpartner)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Während des Berichtszeitraumes wurden in der Triaxialzelle zwei Tests mit den Proben des Institutes für Nichtmetallische Werkstoffe (INW) durchgeführt. Es handelte sich um die Proben auf Phosphatbasis. Nach Beendigung der Versuche konnte keine Verformung bzw. Durchströmung festgestellt werden. Im Anschluss wurden die Proben für weitere REM Untersuchungen an das Institut für Nichtmetallische Werkstoffe weitergeleitet. Derzeit laufen zwei Versuche mit den Proben desselben Institutes. Da die Versuche bis zum Ende des Berichtszeitraumes noch nicht abgeschlossen waren, ist nur eine Teilauswertung möglich. Anhand dieser Zwischenauswertungen ist jedoch erkennbar, dass auch diese Proben bis zum jetzigen Zeitpunkt einem axialen Druck von 17 MPa standhielten und es zu keiner Durchströmung mit gesättigter NaCl-Lauge gekommen ist. Parallel dazu wurden die Wege aufgenommen. Anhand dieser aufgenommenen Wege kann man darauf schließen, dass es zu keiner Deformierung des Probenkörpers gekommen ist.

Parallel zu den Untersuchungen in der Triaxialzelle wurden mit den Proben auf Sulfatbasis (Fa. K-UTEC) und auf Phosphatbasis (INW) Wärmeleitfähigkeitsuntersuchungen durchgeführt. Für die Proben auf Sulfatbasis sind Platten mit den Abmaßen 500 x 500 x 60 mm hergestellt worden und nach ihrer Aushärtung und Trocknung (Trockenschrank 35 °C) in das Messgerät eingebaut worden. Da für die Proben auf Phosphatbasis nicht genügend Material zur Verfügung stand, wurden für diese Proben Platten mit den Abmaßen 250 x 250 x 60 mm hergestellt. Um diese in das Plattenmessgerät einbauen zu können, mussten am Gerät noch einige Umbauten vorgenommen werden.

Die Messung der Wärmeleitfähigkeit erfolgte in Anlehnung an DIN 52 612. Für die Proben auf Sulfatbasis wurde eine mittlere Wärmeleitfähigkeit von 2,49 W/(m K) und für die Proben auf Phosphatbasis von 0,34 W/(m K) ermittelt.

Am 25. Mai fand ein weiteres Projektpartnertreffen statt, mit dem Ziel der Projektkoordination, um über letzte Versuche und den Abschlussbericht zu sprechen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Berichtszeitraum sollen die Versuche mit den Proben auf Phosphatbasis des Institutes für Nichtmetallische Werkstoffe beendet werden.

Einen weiteren Untersuchungsschwerpunkt stellt das Anbindevermögen an das umgebende Salzgebirge dar. Dazu werden Untersuchungen zur Haftscherfestigkeit und Zugfestigkeit mit den beiden optimierten Rezepturen auf Sulfat- bzw. Phosphatbasis durchgeführt.

Weiterhin wird ein Abschlussbericht geschrieben. Das Projekt soll bis Ende September beendet werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1415
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 3		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 290.000,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Wolter	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziel ist die Entwicklung einer gebrauchsfähigen neuartigen Magnesiabinder-Rezeptur mit phosphatischer bzw. sulfatischer Bindung auf der Basis salinärer und/oder salinar-kompatibler Grundstoffe, die

- ein dichtes Gefüge entwickelt (minimale Lösungs- und Gaspermeabilität),
- gegenüber bisherigen Systemen eine deutlich höhere Wasser- und Laugenresistenz aufweist,
- eine entsprechend den geomechanischen Anforderungen ausreichende Stützwirkung und Kriechfähigkeit entwickelt und aufrechterhält,
- leicht einzubringen ist,
- keinen Verdichtungsaufwand erfordert, sondern durch autogene Quellreaktionen selbstverdichtend ist, kraftschlüssig an das umgebende Gestein anbindet, den Quelldruck dauerhaft aufrechterhält und über eine sekundäre Quellung bei Lösungszutritt Umläufigkeiten unterbindet,
- wenig Reaktionswärme freisetzt, um übermäßige Selbsterwärmung zu vermeiden und
- gemessen an den hohen Anforderungen, kostengünstig ist.

Weiterhin soll das Erhärtungsverhalten so steuerbar sein, dass – unbeschadet eines schnellen Erstarrens – die bei der Reaktion entstehende Wärme über einen langen Zeitraum emittiert und dabei auch gut aus dem Verschlussbauwerk abgeleitet werden kann.

Mineralische Bindemittel werden üblicherweise zusammen mit Mineralkörnungen als Verbundwerkstoff konzipiert. Die Magerung verfolgt dabei mehrere Ziele:

- Minimierung des Bindemittelanteils
- Minimierung des Anmischflüssigkeitsbedarfes
- Minimierung der Reaktionswärme bezogen auf den Baustoff insgesamt
- Verbesserte Wärmeableitung ins Nebengestein
- Schneller Aufbau des Expansionsdruckes durch Verminderung der anfänglichen Porosität
- Anpassung der Kriecheigenschaften an das umgebende Wirtsgestein
- Kostenersparnis.

Nach Abschluss dieser umfangreichen Untersuchungen gehen wir von einem Entwicklungsstand aus, der eine Bergerprobung bzw. einen großtechnischen Versuch (Versuchsdamm) zulässt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Rezepturenentwicklung
- Kalorimeteruntersuchungen
- Auswertung der in der Triaxialzelle des IBB getesteten Proben
- Herstellung neuer Probenkörper

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im 1. Halbjahr 2009 wurden die noch ausstehenden Druckfestigkeitsuntersuchungen ermittelt und ausgewertet.

Nachdem die am IBB in der Triaxialzelle getesteten Proben ausgebaut worden sind, hat sich ein widersprüchliches Ergebnis eingestellt.

Im Gegensatz zu den vorherigen Proben der Grundrezeptur 1, wo kein Eindringen der Lauge erkennbar war, hatten diese Rezepturen plötzlich hohe Eindringtiefen von mehr als 10 cm und wurden z. T. sogar durchströmt.

Daraufhin wurden die Rezepturen sehr zeitaufwendig überarbeitet, um die Ursache für dieses Phänomen zu finden. Es wurden erneut Zylinder für Triaxialuntersuchungen am Institut für Bergbau hergestellt. Die Ergebnisse hierzu stehen noch aus.

Die kalorimetrischen Untersuchungen wurden abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Endberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 C 1426
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 503.928,00 EUR	Projektleiter: Dr. Moog	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es wird eine einheitliche, umfassende und konsistente thermodynamische Referenzdatenbasis zur geochemischen Modellierung von Nah- und Fernfeldprozessen für die derzeit in Deutschland diskutierten oder bereits realisierten Wirtsformationen untertägiger Entsorgungseinrichtungen erstellt. Besonderer Wert wird auf eine lückenlose Dokumentation und Rückverfolgbarkeit von Datenbankeinträgen gelegt. Es ist vorgesehen, den bereits in anderen Datenbasen vorhandenen Datenbestand zu integrieren. Eine Datenbank dient als zentrale, gemeinsame technisch-wissenschaftliche Basis, um schrittweise eine konsistenten Datenbasis für relevante thermodynamische Informationen für das System des ozeanischen Salz und für ausgesuchte toxische Elemente zu entwickeln. Gleichzeitig hilft sie bei der Identifikation von Wissenslücken und beim Entwurf von Strategien zu deren Schließung. Im weiteren Verlauf des Vorhabens werden Werkzeuge zur Verfügung gestellt, um automatisiert anwendungsspezifische Parameterdateien aus der Datenbank zu generieren. Es wird eine geeignete Strategie entwickelt, um die Rückverfolgbarkeit jedes Einzeldatums in diesen Parameterdateien bis zur Primärliteratur zu gewährleisten. Die Parameterdateien werden über das Internet der interessierten Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt. Damit wird auch eine nützliche Informations-Rückkopplung an die Bereitsteller der Datenbank ermöglicht. Das Vorhaben THEREDA wird in enger Abstimmung mit den Vorhaben THEREDA-RN (BMW) und THEREDA-SZ (BfS) durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Planung, Strukturierung und Aufbau einer Datenbank zur Aufnahme thermodynamischer Daten
- Entwicklung einer Nutzerschnittstelle zur qualitätsgesicherten Eingabe von Daten in die Datenbank
- Entwicklung, Ergänzung und Dokumentation konsistenter thermodynamischer Datenbasen für Zink, Chrom, Kobalt, Nickel, Kupfer, Arsen, Cadmium, Quecksilber, Blei und Eisen bei 25 °C
- Qualitätsmanagement: Entwicklung von Guidelines zur Bewertung thermodynamischer Daten und zur Aufstellung von Schätzwerten; Validierungen; Durchführung von Konsistenzprüfungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Projektmanagement:

Im Berichtszeitraum erfolgte die Organisation und Durchführung zweier Projektbesprechungen, Koordination des Gesamtvorhabens.

Datenbank:

- Erstellung weiterer Datenbanktabellen zur separater Abspeicherung Pitzer- und SIT-konsistenter Datensätze.
- Implementierung neuer Felder für die interne Qualitätssicherung und die Dokumentation von Daten.

Schnittstellen:

Die auf Excel basierende Eingabeoberfläche wurde weiterentwickelt und den im Verbund beschlossenen Änderungen der Datenbankstruktur angepasst.

Datenerfassung:

Die Daten für die Elemente Cs, Cr und Rb wurden in THEREDA erfasst.

Dokumentation:

- Es wurde im Verbund Übereinstimmung über die grundlegenden Strukturen einer datenbankgestützten Dokumentation von Daten erzielt.
- Es wurde ein Zentralarchiv eingerichtet, in dem alle Quellen, auf die in THEREDA bezogen wird, als Hardcopy abgelegt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Projektmanagement:

Verfassen des Abschlussberichtes.

Schnittstellen:

Anpassung der Excel-Eingabeoberfläche an Änderungen in der Datenbankstruktur.

Dokumentation:

Planung und Implementierung von Kriterien für die interne Qualitätssicherung von Daten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 C 1436
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 109.732,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brendler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundprojektes mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln und der TU Bergakademie Freiberg ist die Erstellung 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 Datenbasen vorhandenen Datenbestand zu integrieren. Die Datenbank hilft bei der Identifikation von Wissenslücken und beim Entwurf von Strategien zu deren Schließung.

Im weiteren Verlauf des Vorhabens werden Werkzeuge zur Verfügung gestellt, um automatisiert anwendungsspezifische Parameterdateien aus der Datenbank zu generieren. Die Parameterdateien werden über das Internet der interessierten Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt. Damit wird auch eine nützliche Informations-Rückkopplung an die Bereitsteller der Datenbank ermöglicht.

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
(Sammeln, Auswerten und Auswählen von Daten und Übertragung in ASCII-Dateien für späteres Einlesen in die Datenbank, FZD: stoffliche Schwerpunkte As und Fe^{III})

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Projektmanagement

- Projekttreffen in Freiberg und Baden (CH)
- kontinuierliche Pflege und Aktualisierung der Intranetseiten unter www.thereda.de

AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation

- Fertigstellung von Kapitel 2 (Konventionen und Strukturen)

AP3: Datenmanagement: Datenbank, Filter, Parameterdateien

- Iterative Verbesserung der Dateneingabertools (gemeinsam mit GRS)
- Fertigstellung des generischen Datenformats basierend auf JSON.

AP4: Datenbasis für Schwermetalle und Arsen

- Fortführung der Literaturrecherche

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Pflege und Erweiterung der Intranetseite, Integration sicherheitsrelevanter Updates für Content Management System, Skriptsprache und Datenbankserver

AP2:

- Erarbeitung von Kapitel 4 (Qualitätssicherung) und 7 (Datenausgabe) des Handbuchs

AP3:

- Fertigstellung des Exportmoduls für das generisches Datenformat

AP4:

- Dateneingabe zu Arsen

5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Altmaier, V. Brendler, S. Gester, S. Hagemann, H.-J. Herbert, C. Marquardt, H. C. Moog, V. Neck, A. Richter, T. Scharge, W. Voigt, S. Wilhelm, T. Willms, G. Wollmann: „THEREDA - A thermodynamic reference database for nuclear waste disposal in Germany”. SIAM Conference on Mathematical & Computational Issues in the Geosciences (GS09), 15-18.06.2009, Leipzig, Germany.

V. Brendler, S. Gester, A. Richter, M. Altmaier, C. Marquardt, V. Neck, H. Moog, S. Hagemann, H.-J. Herbert, T. Willms, W. Voigt, G. Wollmann, S. Wilhelm: „THEREDA - The Thermodynamic Reference Database for Nuclear Waste Disposal in Germany”. Waste Management 2009, Phoenix (AZ), USA, 01.-05.03.2009.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 C 1446
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben TU BAF		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 99.646,00 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 Rossendorf 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.

Im weiteren Verlauf des Vorhabens werden Werkzeuge zur Verfügung gestellt, um automatisiert anwendungsspezifische Parameterdateien aus der Datenbank zu generieren. Die Parameterdateien werden über das Internet der interessierten Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt. Damit wird auch eine nützliche Informations-Rückkopplung an die Bereitsteller der Datenbank ermöglicht.

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 Dresden-Rossendorf, GRS Braunschweig)
- AP5: Datenbasis für das System der ozeanischen Salze (TU BAF)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1/AP2: Projektmanagement, Qualitätsmanagement

- Teilnahme am Projekttreffen bei COLENCO AG in Baden
- Erstellung weiterer PDF-Files mit Ergebnissen für das Internet zur Dokumentation der Datenqualität für die Öffentlichkeit, erreichbar über www.thereda.de oder über <http://www.chemie.tu-freiberg.de/~voigt/thereda.html>.

AP5: Datenbasis für System der ozeanischen Salze

- Weiterführung Literaturlaufarbeitung zu neuen Daten des ozeanischen Systems.
- Beendigung der Arbeiten zur Ermittlung von Pitzer-Parametern zur Wechselwirkung der Komponenten des hexären Systems mit den Säuren HCl und H₂SO₄ für 0 °C ≤ T ≤ 120 °C
- Ermittlung der Temperaturfunktionen der Pitzer-Parameter und Ionenassoziationskonstanten für NaOH, KOH, Mg(OH)₂ und Ca(OH)₂ im Bereich 0 °C ≤ T ≤ 120 °C für die binären und ternären Systeme
- Einarbeitung der Pitzer-Parameter für Carbonate und CO₂ sowie der Löslichkeitskonstanten der Carbonate von Na⁺, K⁺, Mg²⁺, Ca²⁺ für T = 25 °C.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Qualitätsmanagement

- Weitere Mitarbeit am Entwurf der verbindlichen Richtlinien zu: Datenbewertung und -klassifizierung, Nomenklatur von Reaktionen, Temperatur- und Druckfunktionen
- weitere Erarbeitung graphischer Darstellungen der Güte der Systembeschreibung durch die Datenbasis von THEREDA

AP5: Datenbasis für System der ozeanischen Salze

- Erarbeitung des Abschlussberichtes zur Datenbasis des Systems der ozeanischen Salze.

5. Berichte, Veröffentlichungen

G. Wollmann, W. Voigt, "Solid-Liquid Phase Equilibria in the System K₂SO₄-MgSO₄-H₂O at 318.15 K", eingereicht bei J. of Fluid Phase Equilibria.

Zuwendungsempfänger: Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 C 1456
Vorhabensbezeichnung: Bestimmung der Änderung des räumlichen und zeitlichen Ausbreitungsverhaltens von chemotoxischen Schwermetallen nach Wechselwirkung mit Natural Organic Matter (NOM) in geologischen Formationen von Untertagedeponien		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 466.693,00 EUR	Projektleiter: Dr. Mansel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziele dieses Projektes sind eine Erweiterung und Absicherung der thermodynamischen Datenbasis sowie eine kinetische Beschreibung des Verteilungsverhaltens von chemotoxischen Schwermetallen, verursacht durch die Wechselwirkung mit dem Heteroatom Schwefel des NOM. Daher sind Untertagedeponie-relevante georadiochemische Untersuchungen, unter Nahfeldbedingungen im räumlichen und zeitlichen Ausbreitungsverhalten des ternären Systems: chemotoxische Schwermetalle / NOM / Geomatrix im Rahmen des Projektvorhabens durchzuführen. Diese sollen unter den naturnahen Bedingungen der potentiellen Wirtsgesteine realisiert werden. Mit Hilfe von ICP-OES, ICP-MS und CHNOS-Analytik wird das aus nativen Substanzen extrahierte NOM hinsichtlich seiner Haupt- und Nebenbestandteile charakterisiert. Mit Hilfe der Radiotracer-technik kann der sehr niedrige Konzentrationsbereich der Schwermetalle untersucht werden. Durch Radiomarkierung des NOM (^{14}C , $^{125/131}\text{I}$, ^{77}Br) einerseits und der Schwermetalle (^{59}Fe , ^{64}Cu , ^{65}Zn , $^{115\text{m}}\text{Cd}$, $^{203/212}\text{Pb}$, ^{203}Hg) andererseits werden Speziationsuntersuchungen in den drei binären Systemen (M+NOM, M+Geomaterial, NOM+Geomaterial) und dem ternären (M+NOM+Geomaterial) System unter naturnahen Bedingungen durchgeführt. Aus den natürlichen Lagerstätten bildenden Vorgängen soll ein Rückschluss auf das räumliche und zeitliche Rückhaltevermögen für toxische Schwermetalle im Wirtsgestein gezogen werden. Unter Verwendung von XANES und EXAFS sollen die Oxidationszustände des im NOM gebundenen Schwefels und Eisens bestimmt werden. Der Oxidationszustand des Schwefels hat einen wesentlichen Einfluss auf das Komplexierungsverhalten von NOM gegenüber Schwermetallen, bezogen auf die „starken Bindungsstellen“ des NOM. Das Redoxverhalten zwischen Eisen (II, III) und NOM hat einen wesentlichen Einfluss auf das Sorptions- und Migrationsverhalten des mit Schwermetallen beladenen NOM. Die erhaltenen Sorptions- und Komplexierungsdaten chemotoxischer Schwermetalle sollen in die Datenbank ISDA zur Modellerweiterung / Modellzusammenführung integriert werden. Für die Relevanz von Sicherheitsbewertungen sind diese Modelle hinsichtlich Thermodynamik und Kinetik zu aktualisieren bzw. zu erneuern.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Synthese und Reinigung von kommerziell nicht erhältlichen Radioisotopen für die Traceranalytik in geochemisch relevanten Flüssig/Fest-Phasensystemen
- Extraktion, Charakterisierung und Radiomarkierung von NOM

- Ad- / Desorptionsstudien von chemotoxischen Schwermetallen an verschiedenen Geomaterialien mittels Radioisotopen unter naturnahen Bedingungen
- Zeitabhängige Verteilungsmessungen (Ad- / Desorption) von chemotoxischen Schwermetallspezies des NOM an Geomaterialien (Granit, Sand, Kaolinit)
- Komplexierungsstudien von chemotoxischen Schwermetallen mit NOM unter Verwendung von Radioisotopen und unter naturnahen Bedingungen
- Speziation von chemotoxischen Schwermetallen im ternären System Schwermetall / NOM / Geomaterialien mit der Methode der radioaktiven Mehrfachmarkierung
- Speziation der Oxidationszustände des im NOM gebundenen Schwefels (XANES) und Bestimmung der Art der Bindung von chemotoxischen Schwermetallen; Speziation der Redoxzustände des im NOM gebundenen Eisens (II, III) (EXAFS)
- Abschließende Auswertung, Dokumentation und Schlussberichterstellung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Totalazidität und der Karboxylgehalt der Aldrich-Huminsäure (6,03 bzw. 5,23 meq/g) und der Fulvinsäure (8,12 bzw. 5,51 meq/g) wurden bestimmt. Die spezifischen Oberflächen des Granits ($0,32 \pm 0,01 \text{ m}^2/\text{g}$) und Kaolinit $11,94 \pm 0,06 \text{ m}^2/\text{g}$) wurden mittels BET-Analyse bestimmt. Das zeitliche Adsorptionsverhalten von [^{14}C]Huminsäure an Kaolinit deutet auf einen zweistufigen Prozess (schnell: $< 10 \text{ h}$; langsam: $\sim 5 \text{ Tage}$) jeweils erster Reaktionsordnung hin. Die pH-abhängige Adsorption von [^{65}Zn] Zn^{2+} an Kaolinit weist eine pH-Kante bei pH 7,2 auf. Bei Anwesenheit von Huminsäure wird die pH-Kante für das Zn^{2+} nach pH 6,6 verschoben. Die Zn-Adsorption ist auch bei pH > 8 nicht quantitativ, bedingt durch den gelösten Humatkomplex. Die Adsorption von Zn^{2+} an Kaolinit bei Anwesenheit von Huminsäure erfolgt nach erster Reaktionsordnung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Komplexierung von Zn^{2+} mit Huminsäure wird zeitabhängig untersucht. Die Geomatrices Kaolinit und Granit werden mittels ICP-OES nach Mikrowellenaufschluss charakterisiert. Das Adsorptionsverhalten von Cu^{2+} an Granit wird bei Ab- und Anwesenheit von Huminsäure untersucht. Der Einfluss von Fe^{3+} auf das Adsorptionsverhalten von Zn im ternären System Zn^{2+} -Huminsäure-Granit wird untersucht. Der Austausch von adsorbierter Huminsäure an Granit und Kaolinit wird mittels ^{14}C -markierter und nicht radiomarkierter Huminsäure untersucht. Die Oxidationsstufen des im NOM gebundenen Schwefels sollen mit Hilfe von XANES bei ANKA/FZK bestimmt werden. Abschließende Auswertung, Dokumentation und Schlussberichterstellung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

F. Fellmer: „Zeitabhängige Adsorptionsstudien zweiwertiger chemotoxischer Schwermetalle und deren Huminstoffspezies mit Geomaterialien unter Verwendung von Radionukliden.“ Actinidenverbund: Migration von Actiniden im System Ton, Huminstoff, Aquifer, Leipzig, 07.-08.04.2009.

Zuwendungsempfänger: Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Konrad-Wachsmann-Allee 1, 03046 Cottbus		Förderkennzeichen: 02 C 1466
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrogeologie und Geochemie des Gesamtsystems		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.217.647,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Voigt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des TV1 ist die Erkundung der Lösungsdynamik im und am Salzsattel durch eine kombinierte geohydraulische und geochemische Analyse des Gesamtsystems und seiner Teilsysteme (unverfestigtes und verfestigtes Deckgebirge, Salinargebirge, Grubenbaue) unter Nutzung moderner Untersuchungs- und Modellierungswerkzeuge. Das TV1 wird in enger Zusammenarbeit mit den anderen Teilvorhaben des Verbundes durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Geohydraulische Analyse und Entwicklung eines hydrogeologischen Modells
- AP1.1: Erkundung durch Flachbohrungen
- AP1.1.1: Konzeption der Bohrungen
- AP1.1.2: Ausschreibung und Vergabeverfahren der Bohrungen
- AP1.1.3: Kontrolle der Bohrarbeiten und begleitende Tests
- AP1.1.4: Auswertung der Bohrerkundung
- AP1.2: Monitoring und Spezialuntersuchungen zur Analyse von Strömungsvorgängen und Austauschprozessen
- AP1.2.1: Konzeption, Erweiterung und Auswertung des Monitoring zur GW-Beschaffenheit und GW-Dynamik
- AP1.2.2: Orts- und zeitaufgelöstes Monitoring der Grundwasserdynamik im Deckgebirge durch Sohldruckmessungen
- AP1.3: Überführung des geologischen Modells und des Hohlraummodells in ein hydrogeologisches Strukturmodell
- AP2: Geochemische Analyse und Modellierung der Lösungsvorgänge
- AP2.1: Typisierung und Charakterisierung der Lösungen anhand ihrer hydrochemischen Beschaffenheit und ihres Lösungspotentials
- AP2.2: Geochemische Modellierung der Lösungsvorgänge ausgewählter Szenarien/ Reaktionssysteme
- AP2.3: Räumliche Analyse der lösungsanfälligen Bereiche im hydrogeologischen Modell
- AP3: Zusammenfassende Bewertung der Dynamik und Austauschprozesse im Gesamtsystem unter Berücksichtigung geochemischer und hydraulischer Modellierung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Fortführung des systematischen hydraulischen Monitorings in Zusammenarbeit mit BGR und IHU GmbH, Erweiterung des Messnetzes zur Beobachtung der Schachtverfüllungen Leopoldshall I + II, Integration der neu errichteten Messstellen GWE Stf 1, GWE Stf 2
- Fortführung des Oberflächenwassermessprogramm (Wasserstand, Abfluss, Beschaffenheit)
- Stichtagsmessung Wasserstand, Temperatur, elektrische Leitfähigkeit im Gesamtnetz zur Erfassung der hydrogeologischen Situation im Sommerhalbjahr
- Durchführung eine Messkampagne (Messung Abfluss und Oberflächenwasserchemie) zur Abschätzung der Grundwasserzuflüsse in die Bode in Zusammenarbeit mit dem LHW Sachsen-Anhalt
- Planung und Organisation des hydrochemischen Beprobungskampagne Grundwasser 2009 (Juli/Aug.) in Zusammenarbeit mit der IHU und dem LIAG
- Fortführung der geologisch-hydrogeologischen Auswertung und Interpretation und der hydrogeochemischen Modellierungen zum Abgleich mit Isotopenmessungen
- Weiterarbeit am hydrogeologischen Modell in 3D in der Form eines „Platzhalter-Modell“ für die Integration der Ergebnisse des TV2 B2.5, Auswertung der hydraulischen Feldversuche (Tests, Pumpversuche usw.) zur Parametrisierung des Modells
- Vorbereitung und Präsentation der Ergebnisse der einzelnen Arbeitspakete auf dem Projekt-Workshop in Kelbra, Anfertigung von Publikationen

4. Geplante Weiterarbeiten

- Durchführung hydrochemischen Beprobungskampagne Grundwasser 2009 (Juli/Aug.)
- Fortführung der hydrodynamischen Monitoring-Programme
- Mitwirkung an den Erkundungsarbeiten Schacht Achenbach (Start August 2009), nach Möglichkeit Einbeziehung des Schachtes in das Messnetz
- Weiterführung zur vertieften Auswertung der hydrochemischen und hydrodynamischen Daten in Zusammenarbeit mit TV2 (AP 2, 3, 5, 6) und TV10
- Weiterführung der Erarbeitung einer Modellierungsdatenbasis zur exakten Abbildung der Temperaturabhängigkeit der Sättigungsverhältnisse im relevanten Temperaturbereich, hydrogeochemische Modellierungen zu Sättigungsverhältnissen, Reaktionen und Stoffumsätzen
- Fortführung des Aufbaus des hydrogeologischen 3D-Modell in Zusammenarbeit mit TV2 (B2.5) und TV6, Parametrisierung des Modells einschließlich Definition von Randbedingungen), Erarbeitung und Umsetzung eines Konzeptes für einen dichteabhängigen, reaktiven Multispecies-Transports (mit TV6)

5. Berichte, Veröffentlichungen

2 Beiträge (BTU, LIAG + BTU) für die geplante EDGG-Veröffentlichung des Projektverbundes (Jahnke et al. „Hydrogeologie des Raumes Staßfurt – Teil 1 Hydrodynamik“, Stadler et al.: „Hydrogeologie des Raumes Staßfurt – Teil 2 Hydrochemie und Isotopenhydrologie“)

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 C 1476
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 2 (BGR): Geophysikalische Untersuchungen, Seismische Erkundung, Geologisches 3D-Modell, Bohrungen, Server-Datenbank, Koordination des Gesamtvorhabens		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.728.199,00 EUR	Projektleiter: Gerardi	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Teilvorhaben (TV2) wird ein digitales Höhenmodell und ein geologisches 3-D Modell der Salzstruktur und des Deckgebirges zusammen mit den tektonischen Strukturen und den Grubenhöhlräumen für Staßfurt erstellt. Ungeklärte geologische und hydrogeologische Sachverhalte werden durch Bohrungen untersucht. Die Ergebnisse werden mit einer Datenbank in Internet verfügbar gemacht. Mittels airborne LIDAR-Messungen -, Elektromagnetik, Magnetik und Radiometrie werden tektonische Strukturen des Arbeitsgebietes abgebildet. Die Bodengeophysik präzisiert die gefundenen Strukturen. An Messstellen in Flachbohrungen erfolgt ein Langzeitgrundwassermonitoring. Die gewonnenen Daten dienen der hydraulischen Modellierung im TV6. Durch das seismologische Langzeit-Monitoring sollen Bruchereignisse identifiziert und geortet werden, um so das Hohlraum- und das geomechanische Modell (TV3) verifizieren zu können.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das TV2 umfasst folgende Arbeitspakete:

Geophysik (AP1) Laser Scanning / Multispektralaufnahmen: Digitales 3D-Höhenmodell zur Abbildung der Morphologie, geologisch-tektonischer Gegebenheiten und Messung von Höhenänderungen

Geophysik (AP2) Hubschraubergeophysik: Zur geophysikalischen Vermessung großer Flächen mittels Elektromagnetik, Magnetik und Radiometrie.

Geophysik (AP3) Hochauflösende Bodengeophysik: Follow-up der Laserscannermessungen /Multispektralaufnahmen und der Hubschraubergeophysik zur Messung von Lösungsaufstiegsbahnen.

Geophysik (AP4) Hohlschneckenbohrungen mit dem BGR-Bohrgerät: Erstellen von Flachbohrungen bis ca. 60 m Teufe und Ausbau zu Grundwassermessstellen.

Geophysik (AP5) Grundwasser Langzeit-Monitoring in Flachbohrungen: Bestimmung der Salzfracht der Wässer auf Störungszonen (Anomalien durch hochsaline Wässer, Frischwasser).

Geophysik (AP6) Temperaturmessungen in Bohrungen: Messung der Temperaturverteilung.

Geophysik (AP7): Seismologisches Monitoring: Betrieb neuer Seismometerstationen im vorhandenen Messnetz zur Lokalisierung seismischer Ereignisse und Bestimmung dynamischer Parameter.

Geologische 3D- und Hohlraummodellierung: Erstellung eines geologischen 3D-Modells und eines 3D-Hohlraummodells.

Datenbank und Koordination des Gesamtprojekts: Erstellung einer Server-Datenbank als Fachinformationssystem für das Projekt, bildliche (Scanner) und textliche Bohrkerndokumentation. Koordination des Forschungsverbundvorhabens.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP Aerogeophysik: Das Processing der Radiometrie- und Magnetikdaten aus der Hubschrauberbefliegung 2007 wurde abgeschlossen. Die gewonnenen Leitfähigkeitsstrukturen (Modelle) wurden zur Verwendung bei der 3D-Modellierung zur Verfügung gestellt. Mit einer weiterführenden Interpretation wurde begonnen.

AP Bodengeophysik/Grundwasser Monitoring: Beim Schacht Leopoldshall 3 wurde ein 600 m Profil, an der Südwestflanke, und über dem nordöstlichen Salzstrukturrand, östlich der Liethe (zwischen Staßfurt und Rathmannsdorf) wurde ein 800 m Profil gemessen. Über einem Geoelektrikprofil am Strandbad wurde zusätzlich Frequenzbereichs-Elektromagnetik durchgeführt. In der Bohrung GWE STF 2 konnte ein 96 m langer Abschnitt mit der vertikalen BGR-Elektrodenkette gemessen. Untersuchungen der BTU Cottbus (TV1) in den Vorflutern und in der Bode wurden durch Multiparametermessungen von Leitfähigkeit und Temperatur unterstützt. Das Langzeitmonitoring in den Tiefenpegeln wurde plangemäß fortgesetzt.

AP Laserscanbefliegung: Plangemäß wurde die 2. Laserscanbefliegung durchgeführt. Parallel dazu erfolgte die Aufnahme von CIR- und Orthophotos. Aufgrund der Anforderungen der Projektpartner wurde das Befliegungsgebiet im Norden gekürzt und dafür um das Arbeitsgebiet herum erweitert.

AP Seismologisches Monitoring: Die Seismometerstationen (STF1 – STF6) wurden kontinuierlich betrieben und gewartet. Das im Jahre 2008 zusammen mit der Universität Stuttgart durchgeführte Nanoseismische Monitoring gibt Hinweise auf mögliche Bruchereignisse am südlichen Ende der Gruben v. Berlepsch und v. Maybach mit Lokalmagnituden von -1,3 bis -0,9.

AP Geologische 3D- und Hohlraummodellierung: Die Arbeiten am 3D-Hohlraummodell für die Salzbergwerke wurden abgeschlossen. Die geologischen Grenzflächen Salzspiegel, Tertiärbasis, Quartärbasis und Top Kaliflöz konnten teilweise an BTU und WASY übergeben werden. Ferner erfolgten salzgeologische und mineralogisch-geochemische Untersuchungen an Kernen der Bohrungen GWE STF 1 und GWE STF 2. Die HEM- und Seismik-Profile wurden für das 3D-Modell vorbereitet und neue Bohrungen geplant.

AP Server-Datenbank, Tiefbohrung und Koordination des Gesamtprojekts: Die Datenbankpflege wurde fortgesetzt. Die Tiefbohrung GWESTF2 wurde abgeschlossen. Ein 2. Workshop zum Projektstatus fand in Begleitung durch den Beirat im März in Kelbra statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP Aerogeophysik: Interpretation der Geophysikdaten hinsichtlich einer geologischen, hydrogeologischen und strukturellen Deutung für das gesamte Befliegungsgebiet.

AP Bodengeophysik/Grundwassermonitoring: Weitere Messungen zur Klärung von HEM-Indikationen, der Gipsut-Infiltration und Störungssignaturen sind neben einer weiteren geoelektrischen Bohrlochmessung und Multiparameterprofilierungen in den BGR-Messstellen geplant.

AP Hohlschneckenbohrungen: In Zusammenarbeit mit BTU Cottbus (TV1) und IHU Stendal (TV5) werden sechs weitere Erkundungsbohrungen mit Messstellenausbau durchgeführt.

AP Seismisches Monitoring: Die kontinuierlichen seismischen Messungen und die Datenanalyse werden fortgesetzt. In den Bohrungen GWE-STF1 und STF2 sollen Seismometer installiert und ein 2. Nanoseismisches Monitoring durchgeführt werden.

AP Geologische 3D- und Hohlraummodellierung: Auf der Basis der in den Grubenmodellen enthaltenen geologischen Informationen werden unter Zuhilfenahme der seismischen, geoelektrischen und HEM-Untersuchungsergebnisse sowie von geologisch neu interpretierten Bohrungsbefunde geologische 3D-Modelle für repräsentative Teilbereiche der Sattelstruktur erarbeitet. Die Arbeiten zum Nachweis einer Quartärrinne im Gebiet des Solfeldes Staßfurt werden fortgesetzt.

AP Server-Datenbank, Tiefbohrung und Koordination des Gesamtprojekts: Die Datenpflege wird fortgesetzt. Bohrungen zur Lotung des Salzspiegels und zur Grundwasserdynamik und geophysikalischer Messungen sind geplant. Im November findet der 3. Workshop statt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Die Teilvorhaben haben Beiträge für eine gemeinsame Poster-Session auf der GeoDresden2009 der DGG und eine Veröffentlichung des Workshopstatus 02/2009 in der EDGG eingereicht.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1486
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 327.815,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Entwicklung von Modellierungsansätzen für die numerische Simulation bruchhafter Deformationen und der ablaufenden geomechanischen Prozesse zur Prognose der Oberflächenentwicklung über abgesoffenen oder gefluteten Salzbergwerken.

- Entwicklung eines Instrumentariums, mit dem die Ursachen für die Entstehung von Tagesbrüchen quantifiziert und prognostiziert werden können. Anhand von Laboruntersuchungen soll eine Einschätzung des mechanischen Materialverhaltens der in situ anstehenden Gesteine unter besonderer Berücksichtigung der für die Initialisierung rupturer Deformationsprozesse mit der potentiellen Folge von Tagesbrüchen ursächlichen Mechanismen erfolgen.
- Entwicklung von Modellierungsansätzen für die numerische Simulation bruchhafter Deformationen.
- Differenzierte rechnerische Simulation der ablaufenden geomechanischen Prozesse und exemplarische Prognose des Gebirgsverhaltens bei gekoppelter Berechnung bruchhafter und bruchfreier Deformationen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Literaturrecherche zu Tagesbruchmechanismen (Fallbeispiele / Modellierungsansätze).
- AP2: Herstellung von Lagerungsbehältern für Kernmaterial Salzton / Kalisalz.
- AP3: Felsmechanische Laborversuche / Ableitung von Grenzwerten und Randbedingungen für die Initialisierung bruchhafter Deformationen.
- AP4: Entwicklung von Modellierungsansätzen für die numerische Simulation bruchhafter Deformationen und Implementierung in FDM/FEM Software.
- AP5: Exemplarische Prognose des Gebirgstragverhaltens bei gekoppelter Berechnung bruchhafter und bruchfreier Deformationen.
- AP6: Analyse der Berechnungsergebnisse hinsichtlich der Möglichkeit zur Ableitung eines Bewertungsschemas für die Einschätzung der Tagesbruchwahrscheinlichkeit (beschränkt auf ja/nein, nicht aber wann) am Beispiel der Stadt Staßfurt in Verbindung mit den bergbaulich und hydrogeologisch orientierten Teilvorhaben.
- AP7: Schlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen von AP4 und AP5 wurden im abgelaufenen Berichtszeitraum zahlreiche numerische Simulationen für das Profil C-C durchgeführt. Das diskretisierte Modell wurde zu diesem Zweck im Bereich des Tagesbruches verfeinert, um eine gleichmäßige Form der Absenkungsmulde nachrechnen zu können und um die Verformungen im Hangenden über der oberen Kammer nicht zu überschätzen. Dieses Modell wurde für die numerischen Simulationen zur exemplarischen Nachrechnung des Gebirgstragverhaltens, d. h. in diesem Fall zur Nachrechnung des Tagesbruches 1926 vorbereitet und verwendet. Es wurde außerdem eine Sensitivitätsanalyse mit Parametervariation einiger signifikanten Parameter im Rahmen der Streubreiten für dieses Profil durchgeführt.

Die Analyse der Berechnungsergebnisse hat folgendes ergeben:

- 1.) Die Nachrechnung des Tagesbruches 1926 auf Basis der laborativ ermittelten Materialkennwerte ist grundsätzlich unter folgenden Voraussetzungen möglich:
 - a. HA muss als geklüftet betrachtet werden (Abminderung der Gesteinsfestigkeit auf Gebirgsfestigkeit).
 - b. Verformungsmodul im Nachbruchbereich E_{Rest} der jeweils überlagernden Schicht sollte nicht größer sein als E_{Rest} der darunter liegenden Schicht, andernfalls wird eine Gewölbebildung beobachtet.
 - c. Es wird von der Plastifizierung von Kali und Steinsalz in Folge von Zugspannungen ausgegangen.
 - d. Als Kriterium für Abbruch der plastischen Berechnung wird die maximale abgeschätzte Hangendabsenkung aus der Volumenbilanz (Verschluss der Kammer) herangezogen.
- 2.) Entwicklung der Oberflächenabsenkungen, Maximum und Form der Mulde sind stark von den Materialeigenschaften des Untergrundes abhängig. Somit ist ohne hinreichender Untersuchungen keine genaue Abschätzung des Tragverhaltens möglich.
Der Übergang von den Gesteinsparametern zu den Gebirgsparametern muss dabei abgeschätzt werden.
- 3.) Prognose:
Kein weiteres Bruchgeschehen in Profil C-C zu erwarten (vollständig konvergierte Abbauhohlräume) bzw. zukünftige Senkungen sind wesentlich auf den hydraulisch bedingten Abtransport von Salzgestein zurückzuführen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Erstellung eines neuen Berechnungsmodells (Netzgenerierung) für das von den Projektpartnern ermittelte Profil GWE STF2 (Bereich Strandbad)
- Zusammenstellung des Ablaufplans der Rechenläufe (Betriebsgeschichte) für den neuen Schnitt sowie der Absenkungsentwicklung im Schnitt
- Verifikationsberechnungen für den Schnitt mit den laborativ ermittelten Materialparametern entsprechend dem entwickelten Schema
- Datenbankeingabe der Laborversuche
- Schlussbericht

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: K-UTEC AG Salt Technologies, Am Petersenschacht 7, 99706 Sondershausen		Förderkennzeichen: 02 C 1496
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTEC): Grundlagen für Geomodellierung		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 643.387,00 EUR	Projektleiter: Allendorf	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im TV4 sind aktuelle geologisch- geotechnische Daten zu ermitteln, zurückliegende Bergschadensentwicklungen zu rekonstruieren und Aussagen abzuleiten, die als Basisdaten für die Modellerstellung dienen. Die Bearbeitung und Ergebnisdarstellung der einzelnen Arbeitspakete erfolgt dabei in Kooperation mit folgenden Teilvorhaben:

- TV1: (BTU, Cottbus); Beitrag zur geochemischen Modellierung
- TV2: (BGR, Hannover); Beitrag zur Hohlraummodellierung
- TV3: (TUC, Clausthal); Beitrag zur geomechanischen Modellierung
- TV5: (IHU, Stendal); Beitrag zur geologischen Modellierung
- TV6: (WASY, Berlin); Beitrag zur hydrogeologischen Strukturmodellierung

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Beistellung geologischer Informationen zur Salzstruktur aus UT- Aufschlüssen einschließlich notwendiger Recherchearbeiten.
- AP2: Ableitung eines digitalen Geländemodells aus Laserscandaten - 1. Befliegung.
- AP3: Ableitung eines digitalen Geländemodells aus Laserscan - 2. Befliegung.
- AP4: Planungs- und Forschungsleistungen für Tiefbohrungen des LAGB, Sachsen -Anhalt, zur Erweiterung der Datenbasis für die Geomodellierung.
- AP5: Ingenieurtechnische Koordinierung und Begleitung/geowissenschaftliche Bearbeitung der geplanten Tiefbohrungen/Bohrungen.
- AP6: Aufbau eines 3D-Hohlraummodells mit Darstellung der Hohlraumentwicklung.
- AP7: Geochemische Modellierung der Lösungsvorgänge im Salz- und Deckgebirge.
- AP8: Zusammenstellung mechanischer Eigenschaften des deformierten/gefluteten Gebirges.
- AP9: Ausweisung der durch geogene und anthropogene Bruchvorgänge vorgeschädigten Gebirgsbereiche.
- AP10: Darstellung von Ergebnissen des seismischen Monitorings der lokalen seismischen Station Staßfurt im Vergleich mit dem seismologischen Monitoring (BGR).
- AP11: Untersuchungen zur Einschätzung der noch vorh. Tagesbruchwahrscheinlichkeit.
- AP12: Validierung der geomechanischen Berechnungsergebnisse zur OT- Deformation anhand der in- situ durchgeführten Senkungsbeobachtungen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: 2009: Abfrage des unkorrigierten Datensatzes für die Befliegung von 2007 bei TopScan. Der bereits vorliegende Datensatz 2007 enthielt, auf Grund von Korrekturberechnungen, deutliche Artefakte, welche keine vergleichende Betrachtung Differenzenberechnung erlaubte. Erhalt der unkorrigierten Daten im Juni 2009. Nach der Sichtung der Daten wurde mit der Neubearbeitung und Neuberechnung (Differenzenberechnungen) begonnen.
- AP3: April 2009: Befliegungskampagne durch TopScan umgesetzt. Das Befliegungsgebiet stimmte mit dem Befliegungsstreifen von 2007 überein. Erweiterungen erfolgten Richtung E und W (Flanken des Staßfurter Sattels). Lieferung und Sichtung der Daten ist erfolgt.
- AP5: Abschluss ingenieurtechnische Planung, Koordinierung & Betreuung der Bohrungen GWE 1 & GWE 2 (Bohrende: 24.02.2009). Koordinierung des Mess- und Untersuchungsprogrammes der GWE 2. Für die Bohrungen 3 & 4 erfolgte durch K-UTEC die Erstellung der Leistungsverzeichnisse, der Leistungsbeschreibungen, die Einholung von Genehmigungen, die Einholung von Angeboten von BBI & BLM.
- AP10: Zusammenfassende Darstellung der Ergebnisse des seismischen Ortungssystems. Bestandsaufnahme. Kooperation mit der BGR. Weitere Bearbeitung des Themenkomplexes durch die BGR (siehe Projektgespräch am 09.07.2009).
- AP11: Erstellung eines aktualisierten Kartenwerkes zu vorhandenen und neu entstandenen Tagesbrüchen und Erdfällen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Abschluss der Neuberechnungen der Höhendifferenzen mit Hilfe der Daten von 1997, 2000 & 2001. Homogenisierung der Datensätze aus den verschiedenen Erfassungsjahren zum sinnvollen rechnerischen Vergleich der Daten.
- AP3: Homogenisierung der Daten, Berechnung, Darstellung und Interpretation der Höhendifferenzen. Darstellung des Gesamtergebnisses. Abschluss der Arbeiten bis Ende 2009.
- AP5: Aufbereitung & Zusammenstellung der Erkundungsergebnisse der Tiefbohrungen. Planung der Probenahme mit der BTU Cottbus, Festlegung der zu beprobenden Bohrungen und der Probenahmeteufen, Einholung von Angeboten sowie Formulierung der Notwendigkeit der Tiefenprobenahme an den Bohrungen GWE 1 und GWE 2.
- Fortführung von Rechercharbeiten zur Vervollständigung der Montanhistorie im Bergschadensraum. Abschluss der Arbeiten bis Ende 2009 (Präsentation und Zwischenbericht zum 3. Projekt – Workshop, Nov. 2009).
- AP6: Fortführung von Arbeiten zur Ableitung und Erstellung der Grundlagen für das aktualisierte Hohlraummodell anhand lösekinetischer Untersuchungen und der Auswertung der Senkungsentwicklung im Untersuchungsgebiet.
- AP7: Lösekinetische Untersuchungen unter Berücksichtigung der Ergebnisse an den Bohrungen GWE 1 und GWE 2. Abschluss der Untersuchungen bis Oktober 2009. Vorstellung der Ergebnisse zum 3. Projekt - Workshop (Nov. 2009).
- AP8: Analyse vorhandener und zu recherchierender Daten, um In-situ-Parameter für eine geomechanische Modellbildung abzuleiten.
- AP9: Darstellung und Klassifizierung der geologisch- tektonischen Störungselemente und der bergbauinduzierten Bruchvorgänge im Bereich des Bergschadensgebietes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

K-UTEC AG / IHU GmbH (Mai 2008): Abschlussbericht – Erstellung von Erkundungs- und Forschungsbohrungen im Bereich Kali- und Steinsalzbergbau in Staßfurt. Kurztitel: Bohrerkundung / Risikobewertung, Bergschadensraum Staßfurt 2005 – 2008
Veröffentlichung der Vorträge des 2.Workshops zum Forschungsverbundvorhaben „Staßfurt II“ (in Vorbereitung).

Zuwendungsempfänger: IHU Geologie und Analytik Gesellschaft für Ingenieur- Hydro- und Umweltgeologie mbH, Dr.-Kurt-Schumacher-Str. 23, 39576 Stendal		Förderkennzeichen: 02 C 1506
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 5 (IHU): Erfassung, Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 662.064,00 EUR	Projektleiter: Dr. Stahl	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des geplanten Vorhabens ist die Entwicklung eines interdisziplinären Prognosemodells für urbane Räume über abgesoffenen oder gefluteten Salzbergwerken mit bergschadensbedingten Veränderungen im Deckgebirgsstockwerk als Grundlage für ein ökologisch begründetes nachhaltiges Gestaltungs- und Flächennutzungskonzept. Diese methodischen Forschungsarbeiten mit überregionalem Anwendungsbezug sollen exemplarisch am Standort Staßfurt bearbeitet werden.

Die Aufgabenschwerpunkte des Teilvorhabens TV5 liegen in der Erfassung, Bewertung und Darstellung der Struktur- und Hydrogeologie. Dazu werden die vorhandenen Altdaten aufbereitet und mit den im Verbundvorhaben neu gewonnenen Informationen z. B. aus Bohrungen, gebirgsmechanischen Untersuchungen, geophysikalischen Messungen oder hydrochemischen Analysen zusammengeführt. Diese Daten werden in einem dreidimensionalen strukturgeologischen Modell zusammengefasst und für in die geohydraulischen Modellierung der Dynamik des Untersuchungsgebiet überführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Teilvorhaben 5 - Erfassung, Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie gliedert sich in die folgenden Arbeitspakete:

- AP1: Geologisches Modell
- AP2: Erweiterung der Datenbasis durch Bohrungen und geophysikalische Messungen
- AP3: Hydrogeologische Analyse von Strömungsvorgängen und Austauschprozessen
- AP4: Erstellen der Abschlussdokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Schwerpunkte der bisherigen Arbeiten lagen in den Arbeitspaketen 1, 2 und 3. Mit Projektbeginn wurden die vorliegenden geologischen und hydrogeologischen Altdaten zusammengestellt, geprüft und aufbereitet, um sie dann den Projektpartnern zur Verfügung zu stellen. Der Datenbestand wurde und wird durch Recherchen laufend ergänzt und erweitert.

Vom 17. bis 19. März 2009 wurde der zweite Workshop des Verbundvorhabens in Kelbra durchgeführt. Die Arbeitsschwerpunkte waren die Abstimmung mit dem Beirat, die Vorstellung des Projektfortschritts der Teilvorhaben und die Diskussion der weiteren Arbeitsschritte. Ein noch zu präzisierender Punkt ist die Darstellung der Übertragbarkeit des „interdisziplinäres Prognosemodell“ auf andere Bergschadensgebiete. In der Diskussion mit dem Beirat wurde festgestellt, dass es sich dabei nicht um ein technisches Modell handelt, sondern um eine Handlungsempfehlung für die Herangehensweise zur Klärung vergleichbarer Schadenssituationen.

Die Bohrarbeiten der geowissenschaftlichen Erkundungsbohrung GWE STF 2 erfolgten im Zeitraum Januar / Februar 2009. Der Ansatzpunkt der Bohrung liegt in dem vom Gebirgsschlag Ende des 19. Jahrhunderts betroffenem Grubenfeld Leopoldshall. Die Bohrung liegt ca. 560 m südsüdwestlich der Schächte Leopoldshall I und II sowie 200 m nördlich des Strandbades an der Südwestflanke des „Staßfurter Sattels“ und sollte die heutige Hohlrumsituation im Bereich der 3. Etage erkunden. Die Bohrung durchteufte das Kaliflöz und wurde nach Aufschluss von 13,5 m Staßfurtsteinsalz bei 308 m unter Gelände eingestellt. Die Vor-Ort-Fachbegleitung erfolgte vornehmlich durch die K-UTEC und die IHU. Durch die IHU erfolgte die geologische Begleitung und Aufnahme der Bohrung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten im Teilvorhaben werden inhaltlich wie geplant, jedoch mit zeitlicher Verzögerung fortgeführt. Die Schwerpunkte sind die Arbeitspakete 2 und 3: „Erweiterung der Datenbasis durch Bohrungen und geophysikalische Messungen“ sowie „Hydrogeologische Analyse von Strömungsvorgängen und Austauschprozessen“. Im Juli und August sollen weitere Bohrungen abgeteuft werden. Die geologische Fachbegleitung erfolgt wiederum durch die IHU.

Im Anschluss an den Messstellenbau wird die sechste und letzte Kampagne des hydrogeologischen Grund- und Oberflächenwassermonitorings zusammen mit den Projektpartnern durchgeführt werden. Die gewonnenen Daten der Geologie, Hydrogeologie und Hydrochemie werden erfasst, geprüft, aufbereitet und den Partner zur Verfügung gestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: DHI-WASY GmbH, Waltersdorfer Str. 105, 12526 Berlin		Förderkennzeichen: 02 C 1516
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010		Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009
Gesamtkosten des Vorhabens: 367.179,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Diersch

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Forschungsvorhaben zielt auf die Modellierung der Strömungs- und Salzwassertransportprozesse orientiert in einer mehrstufigen Vorgehensweise auf den Aufbau eines regionalen dreidimensionalen Strömungs- und Salzwassertransportmodells mit notwendiger Detailliertheit zur Simulation entsprechender Prozesse in aufgelassenen Salzbergwerken und ihrer Deckgebirge.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- TA1: Prinzipstudien zu Strömungs- und Transportprozessen an Profilschnitten
 TA2: Aufbau von Finite-Element-Modellen für 2D- und 3D-Schematisierungen
 TA3: Simulationen von Strömungs- und Transportprozessen an ausgewählten Modellszenarien
 TA4: Vergleich von Modellierungsergebnissen mit In-situ-Befunden

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es erfolgte die Präzisierung der Modellgeometrie auf der horizontalen Ebene, und insbesondere in der vertikalen Aufteilung unter Berücksichtigung der geohydraulischen Schichtung, die Parametrisierung sowie erste Strömungssimulationen zur Kalibrierung des hydrogeologischen 3D-Strömungsmodells. Nachfolgend sind relevante Arbeitsschritte sowie erzielte Ergebnisse zusammenfassend dargestellt.

Netzverfeinerung des regionalen 3D-Modells:

Zur Berücksichtigung der Grundwasserentnahmenbrunnen wurde das bestehende Modellnetz weiter lokal verfeinert, so dass jedem Brunnen gemäß seiner Lage ein Modellknoten zugeordnet ist, um dort die Belegung einer Brunnen-Randbedingung besser zu ermöglichen.

Grundlagen für den Ausbau des 3D-Modells:

Die Konzeptionelle Schichtung zum Ausbau des 3D-Modells erfolgte durch Abstimmung mit der BGR (TV2: Hammer Gruppe) und der BTU Cottbus (TV1). Demnach sind 10 hydraulische / hydrogeologische Einheiten für die vertikale Diskretisierung maßgeblich. Mit weiterer Aufteilung des Bundsandsteins ergibt sich daraus ein hydrogeologisches Strukturmodell mit 15 hydrogeologischen Schichten (Einheiten), welche als primäre Modellschichten des 3D-GW-Modells gelten. Die maßgeblichen Schichtgrenzen der betrachteten hydrogeologischen Einheiten wurden von der Arbeitsgruppe an der BTU Cottbus, basierend auf den Datengrundlagen der BGR (Hammer Gruppe), schrittweise zur Verfügung gestellt.

Vom LHW Sachsen-Anhalt (April 2009) wurde die flächendifferenzierte Grundwasserneubildung nach PFÜTZNER (PFÜTZNER, 2001, *Bericht zur Bestimmung der Grundwasserneubildung für das LSA auf der Grundlage des Verfahrens „BAGROV/GLUGLA“* - Büro für Angewandte Hydrologie, Berlin, unveröffentlicht) für das gesamte Modellgebiet zur Verfügung gestellt.

Aufbau des 3D-Modells:

Die hydrogeologischen Daten wurden durch Interpolation schichtweise von oben nach unten auf das Modellnetz übertragen. Die Geländeoberkante und die Unterkante mit der einheitlichen Höhe von -1 000 m NN stellen die vertikale Abgrenze des 3D-Modells dar.

Die im 3D-Modell berücksichtigten Randbedingungen sind:

- Gewässer: Bode, Liethe, Mühlgraben, Hauptgraben, Graben Salzstelle, der Beek und Marbegraben. Die berück-

sichtigten Gewässer wurden durch die Gewässerrandbedingung mit entsprechenden mittleren Wässern sowie Transferraten implementiert, wobei die die Kolmationseigenschaft beschreibenden Transferraten als Kalibrierungsparameter gelten.

- Wasserhaltungsmaßnahmen: Berücksichtigt sind die dezentrale Wasserhaltung Brunnen 1 & 2 je mit der Förderung von 50 m³/d, Pumpwerk Steinstraße Brunnen 3 mit der Förderung von 400 m³/d Leistung, Wasserhaltung Achenbach mit der Förderung von 50 m³/d, Wasserhaltung im Moore als Festpotential (Absenkungsziel) von 64,5 m NN sowie Wasserhaltung beim Bergbau Förderstedter Straße als Festpotential von 40,0 m NN.
- Äußere Randbedingungen: Die äußeren Modellränder werden derzeit vereinfachend als Ränder ohne Durchflüsse angenommen. Aufgrund des räumlichen Abstandes der äußeren zu dem eigentlichen Untersuchungsgebiet ist eine solche Vorgehensweise unproblematisch.

Erste Ergebnisse der GW-Strömungsmodellierung:

Ziel der GW-Strömungsmodellierung ist unter der Berücksichtigung der mittleren Wasserstände in der Bode sowie den relevanten Gräben, der Wasserhaltungsmaßnahmen sowie der mittleren Grundwasserneubildung, regionale Grundwasserströmungsverhältnisse, insbesondere in Bereiche der Stadt Staßfurt sowie der Salzabbauergwerke plausible nachzubilden.

Die Bewertung der Simulationsergebnisse erfolgt zuerst durch Plausibilitätskontrolle anhand Stichtagesmessungen (Juli 2008) von 92 GW-Messstellen im oberen Grundwasserleiter aus dem Lockergestein von Quartär/Tertiär. Im Modell konnte das vorherrschende Strömungsregime im Untersuchungsgebiet im Vergleich zu den Stichtagsmessungen gut reproduziert werden.

Sonstige Modellierungsarbeiten:

Es wurde ein ausgewählter Bergwerksbereich in das 3D-FEFLOW-Modell integriert, um technische Verfahren zu erproben. Daten der Bode wurden gesichtet und analysiert (Pegelmessungen, Salzfracht). Aufgrund der unbekanntem Größe von anthropogenen Salzeinleitungen ist zurzeit noch unklar, ob sich mittels dieser Daten eine zusätzliche Kalibrierung des Transportmodells durchführen lässt.

In Abstimmung mit der BTU Cottbus wurden numerische Modelle mit zwei verschiedenen Salzspezies (sog. *multispecies*: NaCl, MgCl₂) berechnet. Dazu wurde der in FEFLOW enthaltene Formeleditor zur Reaktionskinetik verwendet.

Basierend auf einem von der BTU Cottbus/Jahnke bestimmten Polynom wird abhängig von dem in Lösung vorhandenen MgCl₂ eine maximale Sättigungskonzentration NaCl definiert:

$$\text{NaCl}_{\text{max}} = -2,2 \cdot 10^{-9} \cdot \text{MgCl}_2^4 + 3,1 \cdot 10^{-6} \cdot \text{MgCl}_2^3 - 4,3 \cdot 10^{-5} \cdot \text{MgCl}_2^2 - 1,1 \cdot \text{MgCl}_2 + 320$$

und eine Mischdichte

$$\rho_{\text{gemischt}} = 7,15 \cdot 10^{-4} \cdot \text{MgCl}_2 + 6,2 \cdot 10^{-4} \cdot \text{NaCl} + \rho_{\text{H}_2\text{O}}$$

Ziel ist es einerseits bei Anwesenheit von zwei Salzspezies eine korrekte Dichte zu bestimmen, um dichtegetriebene Effekte korrekt abzubilden. Andererseits ist zu prüfen ob es möglich ist bei Vorhandensein ausreichender Daten eine zusätzliche Evaluierung der Modellergebnisse hinsichtlich der Verteilung der beiden Spezies vorzunehmen.

Hier wurden verschiedene Modelle zur Untersuchung dynamischer Prozesse untersucht, die durch Lösen und Fällen von Salz verursacht werden. Bei der Salzfallung werden konstitutive Beziehungen zur Zementierung des Porenraumes berücksichtigt, um hierdurch, eine Limitierung der Maximal ausgefallten Mengen zu erreichen.

Ein interessantes aber nicht unproblematisches Ergebnis dieses Ansatzes ist, dass sich zeigt dass im Wesentlichen eine undurchlässige Kruste gebildet wird. Durch diese Kruste ist ein weiterer Stofftransport dann nicht mehr möglich.

Die nächsten geplanten Arbeitsschritte sind die Berücksichtigung des wieder in Lösung Gehens von gefällttem NaCl. Daneben muss auch eine verbesserte Zeitschrittsteuerung verwendet werden, um eine robuste Lösung zu gewährleisten.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Präzisierung des 3D-Modells mit der aktuellen Modellgeometrie und Parametrisierung,
- Nachkalibrierung des aktualisierten 3D-Strömungsmodells anhand Stichtagsmessungen zur Überprüfung der Plausibilität der berechneten (regionalen) GW-Strömungsverhältnisse sowie durch Analyse der Wasserbilanz,
- Erweiterung des Strömungsmodells zu einem dichtegekoppelten 3D-Stofftransportmodell unter Berücksichtigung der beobachteten Verteilung der Salzkonzentrationen,
- Einbeziehung der vorliegenden Bergwerksgeometrie in das 3D-Modell,
- Modellstudien und Szenarienberechnungen,
- Auswertung der vorliegenden Temperaturmessungen zusammen mit BTU um Rückschlüsse auf advective Prozesse (Wasserwegsamkeiten) zu gewinnen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Die eingereichte Veröffentlichung ist erschienen: A. Renz, W. Rühaak, P. Schätzl and H.-J.G. Diersch, Numerical modeling of geothermal use of mine water: challenges and examples. *Mine Water and the Environment* **28** (2009) 1 (March), 2-14.

Zuwendungsempfänger: Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		Förderkennzeichen: 02 C 1526
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 7 (JoGU): Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 254.420,00 EUR	Projektleiter: Dr. Enzmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Dieses Vorhaben ist Teil des Arbeitspaketes zur zerstörungsfreien Strukturanalyse repräsentativer Bohrkernproben, das sich in vier Aufgaben gliedert:

(1.) Computertomographie der Bohrkernproben (Messungen an der BAM Berlin), (2.) dreidimensionale Visualisierung der inneren Bohrkernstruktur aus den CT-Daten, (3.) Simulation von Fluidmigration in den durch CT ermittelten real-dreidimensionalen Porenraumstrukturen mit Hilfe des Simulationsprogramms „PoreFlow“ und (4.) der Validierung der Modellsimulationen mit Hilfe von orts- und zeitauflösenden Radionuclidversuchen (PET-Tomogramme des TV8: IIF Leipzig).

Untersuchungsziel ist die strukturelle Analyse an repräsentativen Bohrkernproben zur Bestimmung der durchflusswirksamen Klüftigkeit auf der Skala des Porenraums (μm - cm). Die Erkenntnisse, die aus den Strukturdaten und Fluidsimulationen stammen, sollen u. a. als Inputparameter in die (1) geochemischen Lösungssimulationen (TV1, BTU) und (2) großskaligen hydrogeologischen Grundwassertransportmodelle (TV6, WASY) fließen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Durchführung der CT Experimente an Bohrkernproben

AP1.1: Bereitstellung der Bohrkernproben in Absprache mit den beteiligten Projektpartnern

AP1.2: Scannen aller Bohrkernproben mit dem DMT-Corescanner und Datenintegration in die Datenbank „Saltcorebase“

AP1.3: Unterstützung bei bohrlochgeophysikalischen Messungen

AP1.4: Durchführung der CT Experimente und Optimierung der Messverfahren und räumlichen Auflösung (FuE mit BAM)

AP1.5: Übergabe der Proben an das IIF für die PET Experimente

AP2: Auswertung der CT Daten

AP2.1: 3D-Visualisierung der Datensätze

AP2.2: Abgleich mit Corescanner-Daten und Integration / Dokumentation in der Datenbank „Saltcorebase“

AP2.3: Generierungen von Simulationsdatensätzen basierend auf CT-Daten

AP2.4: Durchführung von Fluid- und Tracermigrationssimulationen und Dokumentation der Ergebnisse

AP2.5: Verifikation und Abgleich der Simulationsergebnisse mit den PET-Experimenten und Dokumentation in Saltcorebase

AP2.6: Präzisierungen von Input-Parametern für die Auslaugungs- und Transportmodelle der beteiligten Projektpartner

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Arbeitspakete 2.1 an den Bohrkernen und Proben der LABG-Bohrungen sind abgeschlossen. Auf dem letzten Workshop (03/2009) wurde beschlossen, weitere Kerne der neuen STF-Bohrungen zu untersuchen. 12 Kernproben der STF 1 und STF 2 wurden entnommen und werden gegenwärtig entsprechend AP2.1 bearbeitet.

AP2.2: In 05/08 wurde eine Diplomarbeit zur Charakterisierung von Riss- und Kluftsystemen mit Hilfe des optischen Kernscannverfahrens begonnen. Im Rahmen dieser Arbeit sollen u. a. Daten geophysikalischer Bohrlochmessungen mit den Kernscannerdaten korreliert werden, um eine nachträgliche räumliche Orientierung der Kernbohrungen zu ermöglichen. Die Konzeption und der methodische Ansatz für das Korrelationsverfahren sind entwickelt, die Anwendung auf die vorhandenen Datensätze (Kernscan + Akustiklog-Daten) läuft. Die Diplomarbeit ist krankheitsbedingt noch nicht abgeschlossen.

AP2.3: Die Auswertung und Berechnung der XCT-Daten der LABG-Bohrungen sind weitgehend abgeschlossen. Eine Diplomarbeit zu diesem Thema, angesiedelt im Fachbereich Informatik, konnte ebenfalls abgeschlossen werden. Ergänzend zu den XCT und PET Experimenten wurden an ausgewählten Proben Neutronen-Radiographie und Neutronen-Tomographie (NCT) in Verbindung mit XCT an der NEUTRA und ICON Beamline der PSI-SINQ Anlage, Paul-Scherrer-Institut, Villingen, Schweiz, durchgeführt. Die Auswertung dieser Daten ist ebenfalls in Arbeit, erste Ergebnisse liegen vor und ergänzen sinnvoll die experimentellen PET-Untersuchungen des Projektpartners IIF. Beispiele der Datensätze werden im Zwischenbericht submittiert als EDGG-Sonderband (Enzmann et al., 2009) gezeigt. Diese Datensätze sollen als Datengrundlage für die Fluidmigrations-Simulationen dienen.

Im AP2.4 werden dazu auf dieser Datenbasis Simulationen mit dem Lattice Boltzmann-Algorithmus durchgeführt. Diese liefern als Modellergebnis effektive Transportparameter der an den Bohrkernen gemessenen Mikrostrukturen. Gegenwärtig laufen erste Benchmarktests und die Migration der Simulationssoftware auf das HPC-Cluster des Rechenzentrums der Universität Mainz. Weiterhin wird die Simulationssoftware um einen Term erweitert, der Kluftfüllungen innerhalb der zu simulierenden Strukturen berücksichtigen kann. Die Ergebnisse dieser Simulationen gehen direkt in AP2.6 ein.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erste experimentelle Ergebnisse der PET-Untersuchungen (TV8) können mit den Ergebnissen der XCT-Befunde korreliert werden. Weiterhin wird angestrebt, die begonnene Diplomarbeit mit der thematischen Bearbeitung der Nachorientierung von Kernscann-Daten im Laufe des 4. Quartals 2009 abzuschließen und die Methodik sowie die Ergebnisse dem Projekt (Integration in die Datenbank) zugänglich zu machen. Schwerpunkt in der aktuellen Projektphase ist AP2.3. Auf dem nächsten geplanten Projektworkshop im November 2009 werden Ergebnisse vorgestellt und diskutiert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kulenkampff, J., Gründig, M., Richter, M., Enzmann, F. (2008): Evaluation of Positron-Emission-Tomography for visualization of migration processes in geomaterials. *Phys. Chem. Earth* 33 (2008) 937-942.

Szeder, T., Janz, M., Enzmann, F., Schwarz, J.-O., Rheingans, K., Goebbels, J. (2008): Application of High Resolution 2D Rock-Core Scanning and 3D X-Ray Computed Tomography to Investigate Geological Features.; Posterpresentation MSE 2008; Nürnberg.

Enzmann, F., Meier, T., Janz, M., Jovanovic, Z., Rheingans, K., Schwarz, J.-O., Göbbels, J., Kersten, M. (2009): Bestimmung durchflusswirksamer Porosität an Bohrkernproben mittels Computer-Tomographie, submittiert als Beitrag zu einem Sonderband der EDGG.

Wolf, M., Kulenkampff, J., Lippmann-Pipke, J., Gründig, M., Enzmann, F., Richter, M. (2009): 3D-visualisation and modelling of transport processes in heterogeneous structures. Poster, TRePro II 2009 – Workshop on Modeling of Coupled Reactive Transport Processes, 18.-19.03.2009.

Zuwendungsempfänger: Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 C 1536
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 173.362,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kulenkampff	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit tomographischen Radiotracerverfahren (PET) werden an Bohrkernen aus verschiedenen Gesteinsformationen des Staßfurter Gebietes lokale Transport- und Lösungsprozesse untersucht und in Verbindung mit den an der JGU Mainz (TV7) durchgeführten CT-Messungen Daten zur Modellierung dieser Prozesse ermittelt. Die zu untersuchenden Bohrkern- und Lösungszusammensetzungen werden in Absprache mit den Verbundpartnern (BTU Cottbus, TV1; TU Clausthal, TV3; K-UTEC Sondershausen, TV4; IHU Stendahl, TV5) ausgewählt. Die zu erwartenden Ergebnisse erweitern das Prozessverständnis und die Datenbasis für die geochemische und geohydrologische Modellierung. In Kooperation mit den Verbundpartnern werden die wissenschaftlichen Grundlagen für die entsprechenden Modelle erweitert und damit die Genauigkeit der Modellansätze erhöht. Eine Übertragung auf die Feldskala wird mit Hilfe von Fluoreszenztraceruntersuchungen in Zusammenarbeit mit der BTU Cottbus (TV1) unternommen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung und Test geeigneter PET-Tracer
- AP2: Beschaffung und Inbetriebnahme eines Animal-PET
- AP3: Probenahme und Anpassung der Injektionsmethodik
- AP4: PET-Untersuchung des Fluidtransports an Proben aus dem Deckgestein
- AP5: PET-Untersuchung der Transport- und Löseprozesse an Proben aus der Lagerstätte
- AP6: PET-Untersuchung nach geomechanischer Belastung
- AP7: Bestimmung der räumlichen Verteilung der Transport- und Kinetikparameter
- AP8: Fluoreszenztraceruntersuchungen
- AP9: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Der Ablauf der Bildrekonstruktion und -korrektur wurde an die Erfordernisse für Geomaterialien angepasst, so dass die quantitative Auswertung nun möglich ist. Derzeit werden Nachbesserungsarbeiten zur Optimierung der Stabilität der Detektoren durchgeführt.
- AP4: Es wurden detaillierte Untersuchungen des Tracertransports mit unterschiedlichen Fließraten in einer Buntsandsteinprobe aus Bohrung B durchgeführt, bei der Zonen mit stark lokalisierten präferentiellen Flüssen mit sehr hoher Abstandsgeschwindigkeit und Zonen mit diffusum Transport auftreten.
- AP5: Die Diffusionsexperimente an Steinsalzproben zeigten innerhalb der dreiwöchigen Versuchsdauer keine erkennbare Änderung der räumlichen Tracerverteilung und somit keinen Hinweis auf Transport in das Material; die Proben sind intakt geblieben. Aufgrund des technisch sehr erfolgreichen Verlaufs der Experimente sollen ähnliche Experimente in Zukunft mit längerlebigen PET-Tracern durchgeführt werden.
- AP6: Mechanisch vorbelastete Proben aus TV3 wurden für Tracerversuche vorbereitet.
- AP7: Derzeit werden einfache Modelle zur Parameterableitung angewendet und Heterogenitätsparameter definiert. Hierbei haben sich Rekonstruktionsartefakte als störend erwiesen, die sich vermutlich durch eine geeignete Streukorrektur und mit Hilfe von Deconvolutionsverfahren reduzieren oder beheben lassen. Lösungsansätze zur Verringerung ähnlicher Artefakte sind bereits aus der biomedizinischen Anwendung von 3D-PET bekannt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Halbjahr werden Messungen an den mechanisch belasteten Proben sowie an neu gewonnenen intakten Bohrkernen (derzeit in Bearbeitung bei TV7) durchgeführt.

Die Methoden zur Parameterableitung werden verbessert und angewendet. Als Voraussetzung wird eine modellgestützte Streukorrektur entwickelt, um die störenden Einflüsse der Rekonstruktionsartefakte zu mindern.

5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Kulenkampff, C. Gajewski, M. Gründig, J. Lippmann-Pipke, H. Mittmann, M. Richter, and M. Wolf: Visualisation and Quantification of Transport in Barrier Rocks with Positron Emission Tomography. Geophysical Research Abstracts, Vol. 11, EGU2009-4382, 2009

M. Wolf, J. Kulenkampff, J. Lippmann-Pipke, M. Gründig, F. Enzmann, M. Richter: 3D-visualisation and modelling of transport processes in heterogeneous structures. Poster, TRePro II 2009 – Workshop on Modeling of Coupled Reactive Transport Processes, 18.-19.03.2009

Zuwendungsempfänger: Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik (LIAG), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 C 1546
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 9 (GGA-S1): Deckgebirgseigenschaften über einem bergbaubedingt destabilisiertem Untergrund, abgeleitet aus seismischen Beobachtungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 265.635,00 EUR	Projektleiter: Dr. Polom	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des TV9 ist die gebirgsmechanische Analyse und Bewertung des Tragverhaltens des Gebirges über und in den abgesoffenen und z. T. verbrochenen Grubenbauen sowie Ursachenforschung zur Hydrodynamik im oberflächennahen und tieferen Grundwasserstockwerk mit ihren vielfältigen Wechselwirkungen und Lösungsvorgängen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Erfassung der realen physikalischen Strukturierung der Formation und ihrer internen elastomechanischen Eigenschaften mittels eines 2D-seismischen Profilnetzes unter kombinierter Verwendung von P- und S-Raumwellen und Überführung in das geologische Modell.
- Einbindung dieses Profilnetzes in die punktuell vorliegenden Informationen aus Flach- und Tiefbohrungen (BTU Cottbus) zur schlüssigen Verknüpfung und Extrapolation in die Fläche.
- Anschließende Verschneidung mit anderen Flächen- bzw. Rauminformationen aus der Aerogeophysik, Geoelektrik, Elektromagnetik und dem seismologischen Monitoring (alle BGR).
- Zur Teufenkalibrierung der seismischen Oberflächenmessungen und zur Verifizierung anderer bohrlochgeophysikalischer Daten (K-UTEK) werden zusätzlich vertikalseismische Profile (VSP) unter Verwendung einer digitalen 3K-Geophonsonde und vibrationsseismischer P- und S-Quellen in den Tiefbohrungen sowie in ausgewählten Flachbohrungen durchgeführt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In Zusammenarbeit mit dem TV2 ist zwischenzeitlich das Messgebiet nördlich des Sodawerkes zwischen Staßfurt und Neustaßfurt in den Fokus der Auswertung gerückt, das derzeit als Solfeld genutzt wird. Eine vom TV2 vermutete quartäre Rinne in diesem Messgebiet wird offensichtlich auch in dem seismischen Profil Soda 2 abgebildet. Durch eine iterative Datenbearbeitung dieses Profils konnte die seismische Strukturabbildung schlüssig mit dem aus Bohrungen abgeleiteten geologischen Modell dieses Gebietes verknüpft werden. Die Tiefenlage der Reflektoren in der seismischen Sektion konnte durch detaillierte Analyse der seismischen Geschwindigkeitsfelder und der Bohrungen referenziert und korrigiert werden, was zu einer präziseren Tiefenkonversion führte.

Alle Tiefenkonversion der seismischen Profile im Raum Staßfurt wurden auf Grund nur spärlich vorhandenen Geschwindigkeitsinformationen aus Bohrungsgeophysik bisher ausschließlich mit Hilfe der aus den seismischen Daten abgeleiteten Stapelgeschwindigkeiten durchgeführt. Dieses auch aufgrund der starken Strukturneigungen vergleichsweise unsichere Verfahren ist in der ersten Phase des Projek-

tes eingeführt worden, um vorab zumindest eine Abschätzung über die Teufenlage der Reflektoren zu treffen. Erst durch die detaillierte Auswertung des von der Fa. BLM Gommern in der Bohrung GWE STF 2 erstmals erfolgreich durchgeführten Sonic-Logs konnte diese Form der Tiefenabschätzung zumindest für den Bereich Strandsolbad als hinreichend zutreffend verifiziert werden. Das in der Bohrung GWE STF 1 mit identischem Messsystem durchgeführte Sonic-Log lieferte dagegen aufgrund einer derzeit unerklärlichen, vollständigen Signalabsorption im Bohrloch keinerlei auswertbare Signale für die Geschwindigkeitsbestimmung in der Deckgebirgsformation.

Ein Teil der abgeschlossenen und aktuell noch laufenden Arbeiten befassen sich mit der weiteren Bearbeitung der Daten in Bezug auf eine sorgfältige Tiefenkonversion der P-Wellenprofile. Parallel dazu wird in enger Zusammenarbeit mit dem TV2 an der stratigraphischen Einordnung der entsprechenden Horizonte mit Hilfe von geologischen und geophysikalischen Ergebnissen aus Bohrungen gearbeitet. Des Weiteren werden in der Seismik sichtbare Indikationen für Störungen auf ihre Plausibilität geprüft, um Aussagen über Störungen und Zerrüttungszonen treffen zu können. Einen weiteren Arbeitspunkt bildet das laufende Prozessing der S-Wellenprofile, um zu einem späteren Zeitpunkt Informationen aus beiden seismischen Verfahren miteinander zu kombinieren.

Der für die seismische Datenbearbeitung zuständige Mitarbeiter Thomas Leder hat vom 7. Februar bis 6. April 2009 eine zweimonatige Elternzeit in Anspruch genommen. Während dieser Zeit wurden die Arbeiten vertretungsweise durch die Projektleitung ausgeübt. Die durch diese - seitens des Gesetzgebers eingeräumte - Maßnahme eingesparten Personalmittel werden kostenneutral im Rahmen einer Verlängerung der ursprünglich für das Jahr 2009 angesetzten Arbeitsplanung verwendet, so dass hierdurch keine Defizite bei der Zielerreichung auftreten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Ergänzend zu den geplanten Weiterarbeiten in Bezug auf die Bearbeitung der seismischen Daten und der Verschneidung der Ergebnisse mit den Projektpartnern ist eine abschließende Messkampagne im Zeitraum August/September 2009 in der Planung. Im Rahmen dieser Messungen wird eine seismische Profillinie in Kombination mit einer einfach überdeckten 3-D-Messfläche direkt über das Areal des Strandsolbades angeordnet. Die Anlage dieser abschließenden, kombinierten 2D und 3D-Messung erfolgt zum einen aufgrund der erwarteten komplizierten Einbruchsstruktur, der hier ausnahmsweise im Untersuchungsgebiet vorliegenden Zugänglichkeit des Geländes für 3D-Untersuchungen und der im Raum Staßfurt selten gegebenen Möglichkeit für eine senkrecht zum erwarteten Sattelstreichen angeordnete Profilführung. Die Anordnung der Empfänger erfolgt dabei in Form eines Kreuzes, um seismische Daten mit direkter Relevanz zum Umfeld des historischen Erdfall Strandsolbad zu erhalten, dessen Einbruchsvolumen derzeit noch nicht mit den verzeichneten Volumina des Altbergbau erklärt werden kann. Die Messungen werden in Koordination mit den zuständigen Eigentümern und Pächtern erst nach der Aberntung der Felder um das Strandbad herum stattfinden, die im Wesentlichen durch die Witterungsentwicklung vorgegeben wird. Die Betretungsgenehmigungen und Gestattungen zur Durchführung der Messungen auf den Feldern und dem Areal des Strandsolbades liegen bereits vor.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Die im Rahmen des 2. Workshops im März 2009 in Kelbra vorgestellten aktuellen Arbeitsergebnisse werden zusammen mit den vorgestellten Arbeitsergebnissen der Projektpartner in einem Sonderband der EDGG veröffentlicht werden. Hierzu wurde ein erster Manuskriptentwurf angefertigt.

Zuwendungsempfänger: Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik (LIAG), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 C 1556
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 253.554,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Frechen	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Teilvorhabens TV10 ist die isotopenhydrologische Charakterisierung der Grundwässer zum Nachweis von hydraulischen Verbindungen und dem Zu- und Abflussverhalten der Wasserreservoirs der gefluteten Salzbergwerke.

- Isotopenhydrologische Untersuchung der untertägigen Wässer sowie des Vorfluters im Bereich der Stadt Staßfurt
- Quantifizierung von Mischungen zwischen Wässern und Salzlösungen unterschiedlicher Herkunft
- Rekonstruktion lokaler Wasserfließsysteme
- Interpretation der hydrodynamischen Zusammenhänge als Ergebnis des multidisziplinären Gesamtkonzeptes der Arbeitsgruppe

Die Auswahl geeigneter Bohrungen, Pegel und Wasserbrunnen für die Beprobung im Untersuchungsgebiet findet in enger Abstimmung mit den Projektpartnern, insbesondere BTU Cottbus (TV1), K-UTECH (TV4) und IHU Stendal (TV5) statt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das TV10 umfasst folgendes Arbeitsprogramm:

- Pflege des Datenbestandes inkl. Datenrecherche und Erweiterung des Altdatenbestandes
- Isotopenhydrologische Probennahme vor Ort aus den Tiefbohrungen und aus den Flachpegeln
- Isotopenhydrologische Messanalytik im Labor. Untersuchung der stabilen Isotope, Tritium, Tritium/³Helium, ¹⁴C-Datierung, FCKW und SF₆.
- Dateninterpretation:
 - Bestimmung der Alterstruktur der salinaren Wässer und damit der Verweilzeiten und des Zu- und Abstroms
 - Rekonstruktion der lokalen Wasserfließsysteme bzw. der hydrodynamischen Verhältnisse
 - Beurteilung der Migration von Wasser und Lösungen, mit denen ein weiterer Lösungsangriff innerhalb der Flutungsräume verbunden sein kann
- Publikation der Ergebnisse auf Tagungen und in einschlägigen Fachzeitschriften.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Februar 2009 erfolgte die Entnahme von Wasserproben an wasserführenden Horizonten der neuen Tiefbohrung GWE Stf 2, um daran ^2H , ^{18}O , ^{14}C , ^3H , $^3\text{He}/^4\text{He}$, $^{20}\text{Ne}/^{22}\text{Ne}$ und FCKW/SF₆ zu untersuchen. Im März erfolgte eine Beprobung des Wassers in der Tiefbohrung G4 auf die o. g. Parameter. Im März wurden außerdem im Rahmen des 2. Workshops des Forschungsverbundes (mit integrierter Sitzung des wissenschaftlichen Beirats) vom 17. bis 19.03.2009 in Kelbra Ergebnisse der isopenhydrologischen Beprobung und Auswertung dargestellt. Im Nachlauf zu dem Workshop wurde eine Publikation für einen EDGG (Deutsche Gesellschaft für Geowissenschaften)-Sonderband verfasst, die im Herbst diesen Jahres erscheinen wird (Stadler et al. in Druck). Außerdem wurde ein Tagungsbeitrag für die GeoDresden2009 eingereicht (Bohn et al. eingereicht).

Nach Einbeziehung hydrochemischer (Haupt- und Spurenelemente) und geophysikalischer (Hubschrauberelektromagnetik) Projektdaten wurde eine finale Probenahme geplant, die Erkenntnisse zu Salzaufstieg und Versüßungszonen im quartären Lockergesteinsaquifer berücksichtigt. Die Probenahme wird Ende Juli/Anfang August in Stassfurt durchgeführt werden.

Weiterhin wurde im Berichtszeitraum die Analytik der Grundwasserproben auf ^2H , ^{18}O , ^{14}C (LIAG Hannover), ^3H , $^3\text{He}/^4\text{He}$, $^{20}\text{Ne}/^{22}\text{Ne}$ (Universität Bremen), FCKW/SF₆ (Spurenstofflabor Oster, Wachenheim) fortgeführt und weitestgehend abgeschlossen. Die Strontiumisotopenanalytik ist noch fortlaufend und wird derzeit durch Untersuchungen der Magnesiumisotopie einzelner Proben komplementiert. Außerdem läuft die Auswertung und Modellierung der einzelnen Umwelttracerergebnisse zur Bewertung von Grundwasserverweilzeiten in den einzelnen Aquiferstockwerken.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortlaufende Analytik und detaillierte Interpretation gewonnener Daten. Hierbei wird in enger Zusammenarbeit mit der BTU Cottbus verfahren. Messung der noch zu entnehmende Wasserproben im LIAG-Labor (stabile Isotope und ^{14}C -Datierung) sowie Vergabe von Analytaufträgen (Tritium und Helium) der Probenahme im Juli/August 2009 der voraussichtlich letzten Proben.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Stadler, S., Jahnke, C., Bohn, A. (im Druck): Hydrogeologie des Raumes Staßfurt – Teil 2 Hydrochemie und Isopenhydrologie. - EDGG (Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften) - Sonderband.

Bohn, A., Diersch, H.J., Herrmann, F., Jahnke, C., Luo, J., Rühaak, W., Stadler, S., Voigt, H.J., Walter, N. (eingereicht): Forschungsverbundvorhaben »Dynamik abgeöffneter oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks« - Hydrogeologische Prozesse und deren Beziehungen zu Bergbaufolgeschäden im ehemaligen Kalibergbau der Stadt Staßfurt - Analyse und Modellierung. Abstract, GeoDresden2009, 30.09.-02.10.2009.

Zuwendungsempfänger: Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		Förderkennzeichen: 02 C 1577
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2007 bis 30.04.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 238.963,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hampel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel (FKZ 02C1577), IfG Leipzig (02C1587), FZ Karlsruhe (02C1597), Universität Hannover (02C1607) und TU Clausthal (02C1617) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Einlagerung von gefährlichen Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern.

Dieses Folgevorhaben setzt inhaltlich das Verbundprojekt "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) fort. Im Folgevorhaben führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem 3D-Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einem realen Untertagebauwerk im Steinsalz durch. Dabei wird auch die Permeabilitätsentwicklung in der Auflockerungszone einbezogen sowie eine Langzeitextrapolation des mechanischen Verhaltens vorgenommen. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Start-Workshop der Projektpartner
- AP2: Planung und Durchführung des untertägigen Bohr- und Messprogramms sowie der Laboruntersuchungen
- AP3: Vorbereitung der Modellrechnungen einschließlich der Bestimmung von salztypspezifischen Kennwerten für die Stoffgesetzparameter
- AP4: 3D-Modellberechnungen eines untertägigen Grubenausschnitts mit FEM / FDM
- AP5: Erstellung von Ergebnisberichten durch die Projektpartner
- AP6: Vergleich der Stoffgesetze, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen, Ausarbeitung von Empfehlungen
- AP7: Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner
- AP8: Durchführung eines öffentlichen Ergebnis-Workshops
- AP9: Schriftliche Dokumentation der Ergebnisse (Abschlussbericht und Veröffentlichung)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger 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 das Finite-Differenzen-Programm FLAC-3D (Fa. Itasca).

Im Berichtszeitraum führte der Zuwendungsempfänger weitere umfangreiche Berechnungen zu der gemeinsamen Studie der Projektpartner zum Einfluss der Modelldiskretisierung auf Simulationsergebnisse durch. Dazu wurden unterschiedlich fein vernetzte Kammer-Langpfeiler-Modelle mit einer konstanten Pfeilerstauchungsrate von $1E-5$ 1/s bis in den Nachbruchbereich belastet. Durch das Löschen weit nach dem Bruch stark entfestigter Elemente wurden Stoßausbrüche sowie in die Kammerförschte und -sohle eindringende Risse erfolgreich simuliert. Mit eingeschobenen elastischen und/oder Kriechrelaxationen wurde sichergestellt, dass die Ergebnisse nicht durch numerische Ungleichgewichtskräfte nach dem Löschen der Elemente beeinflusst wurden. Aufgrund der Ergebnisse der Vernetzungsstudie verfeinerte der Zuwendungsempfänger anschließend sein FLAC-3D-Modell des gemeinsam allen Partnern vorgegebenen Ausschnitts der Grube Angersdorf in einigen Bereichen. Mit diesem überarbeiteten Modell berechnete er den Anfangsspannungszustand mit und ohne Initialisierung des teufenabhängigen Spannungsgradienten sowie unter Ansatz einer elastischen Verformung und des Kriechens. Anschließend begann er die Kriechsimulation des Modells mit aufgefahrenen untertägigen Hohlräumen und verwendete dabei anhand neuer Laborversuchsergebnisse des IfG und der TUC präzisierete CDM-Parameterkennwerte für das Steinsalz der Grube Angersdorf.

Außerdem erstellte er die Vergleiche der Ergebnisse der Partner zur Vernetzungsstudie sowie zum Anfangsspannungszustand im Modell des Grubenausschnitts. Letzterer dient als Basis für den Vergleich der Kriechsimulationsergebnisse nach Auffahrung der Hohlräume.

Die jeweiligen Zwischenergebnisse sowie die Ergebnisvergleiche wurden auf dem 6. und 7. Projektworkshop im März und Juni 2009 präsentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr 2009 wird der Zuwendungsempfänger die Kriechsimulationsrechnungen mit dem Modell des Grubenausschnitts Angersdorf bis 50 Jahre (Zustand „heute“) und 100 Jahre („Prognose“) nach der Auffahrung der untertägigen Hohlräume weiterführen. Auch hier schließt sich ein Ergebnisvergleich der Partner zur Entwicklung der Spannungen, Verformungen, Dilatanz, Schädigung und Permeabilität an. Außerdem ist der Einzelbericht zu erstellen.

Der Zuwendungsempfänger wird zudem die Koordination des Verbundprojekts und die Organisation der Projektworkshops – der Achte ist für Anfang Oktober 2009 geplant - weiterführen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zum CDM-Stoffgesetz und zum Vorgänger-Verbundprojekt:

- 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. (2007): Vergleich aktueller Stoffgesetze für die Modellierung von Untertagebauwerken im Steinsalz. – In: C. Drebenstedt, W. Kudla, H. Konietzky & B. Jung (Hrsg.): Modellierung, Simulation und Visualisierung von Prozessen in Bergbau und Bauwesen; Freiburger Forschungsforum, 58. Berg- und Hüttenmännischer Tag 2007, Freiburger Forschungshefte, C515 Geingenieurwesen, TU Bergakademie Freiberg, S. 211-224.
- 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.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 C 1587
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2007 bis 30.04.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 281.450,00 EUR	Projektleiter: Dr. Salzer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel (FKZ 02C1577), IfG Leipzig (02C1587), FZ Karlsruhe (02C1597), Universität Hannover (02C1607) und TU Clausthal (02C1617) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Einlagerung von gefährlichen Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern.

Dieses Folgevorhaben setzt inhaltlich das Verbundprojekt "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) fort. Im Folgevorhaben führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem 3D-Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einem realen Untertagebauwerk im Steinsalz durch. Dabei wird auch die Permeabilitätsentwicklung in der Auflockerungszone einbezogen sowie eine Langzeitextrapolation des mechanischen Verhaltens vorgenommen. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Start-Workshop der Projektpartner
- AP2: Planung und Durchführung des untertägigen Bohr- und Messprogramms sowie der Laboruntersuchungen
- AP3: Vorbereitung der Modellrechnungen einschließlich der Bestimmung von salztypspezifischen Kennwerten für die Stoffgesetzparameter
- AP4: 3D-Modellberechnungen eines untertägigen Grubenausschnitts mit FEM / FDM
- AP5: Erstellung von Ergebnisberichten durch die Projektpartner
- AP6: Vergleich der Stoffgesetze, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen, Ausarbeitung von Empfehlungen
- AP7: Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner
- AP8: Durchführung eines öffentlichen Ergebnis-Workshops
- AP9: Schriftliche Dokumentation der Ergebnisse (Abschlussbericht und Veröffentlichung)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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 FLAC-3D.

Das IfG hat im Berichtszeitraum die In-situ-Messungen in der Grube Teutschenthal bzw. Angersdorf abgeschlossen, wobei geplant ist, die Pfeilerquerdehnungsmessungen bis zum Abschluss des Vorhabens weiterzuführen. Daraus kann für den Messhorizont zwischen den Kammern VIII und IX eine Pfeilerquerdehnungsrate von ca. 4 mm/a abgeschätzt werden.

Mit Frac-Messungen wurde die Verteilung der minimalen Hauptspannungskomponente in einer benachbarten horizontalen Messbohrung ermittelt. Dabei wurden im Pfeilerkern Maximalwerte von ca. 5,5 MPa bestimmt, wobei der Anstieg der Minimalspannungen auf der Seite von Kammer VIII schneller als von der Seite der Kammer IX erfolgt. Dieser Fakt lässt sich mit der Wirkung des Teilversatzes in Kammer VIII erklären, von dem aus die Messbohrungen erfolgten, während Kammer IX unversetzt ist.

Aus den Druckabfallkurven der Dichtheitstest, die vor den eigentlichen Frac-Messungen gewonnen wurden, konnten Permeabilitäten und Porositäten mit einem rotationssymmetrischen Strömungsmodelle für das abgepackte Bohrloch auf der Basis von FLAC ermittelt werden. Die Permeabilitäten im Pfeilerkern liegen bei 10^{-20} m^2 , die entsprechenden Porositäten bei ca. 0,002. Infolge der Versatzdruckwirkung steigen diese Werte auf der Seite von Kammer VIII lediglich bis auf 10^{-16} m^2 bzw. 0,007 an, während sie an der Kontur der unversetzten Kammer IX bis auf 10^{-15} m^2 bzw. 0,009 ansteigen.

Weiterhin wurden zusätzlich drei triaxiale Druckversuche ($\sigma_3 = 0,5; 2,0$ und $7,0 \text{ MPa}$) mit einer erhöhten Verformungsrate von $2,5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ durchgeführt, die mit einer hydrostatischen Konsolidierung bei 20 MPa über 12 h begonnen wurden. Diese Versuche sollen der Validierung der Geschwindigkeitsabhängigkeit der Stoffmodelle dienen.

Mit dem FLAC-3D-Modell des gemeinsam für die Benchmark-Modellrechnungen ausgewählten Ausschnitts der Grube Angersdorf und auf der Basis der gesteinsmechanischen Anpassungen wurden mit beiden Stoffmodellen Prognoserechnungen durchgeführt, die an die beobachtete Senkungsentwicklung angepasst und mit den Ergebnissen der In-situ-Messungen für den Ist-Zustand verglichen wurden, wobei sich eine gute Übereinstimmung zeigte. Dabei wurden zunächst Prognoserechnungen bis zu 140 a (Modell Minkley) bzw. bis zu 169 Jahren (Modell Günther/Salzer) realisiert. Weiterhin wurde die auf Vorschlag des IfG zusätzlich durch die Vorhabenspartner beschlossene Studie zur Vernetzungsabhängigkeit am Beispiel eines Einzelpfeilermodells für beide Stoffmodelle abgeschlossen und auf dem 6. WS dargestellt. Dabei zeigte sich, dass für eine Zonenanzahl von > 10 pro Pfeilerhöhe und halbe Pfeilerbreite keine signifikante Änderung der berechneten maximalen Pfeilertragfähigkeit mehr zu belegen ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im Zweiten Halbjahr 2009 wird das IfG die Berechnungen mit beiden Stoffmodellen und die Erstellung des Einzelberichtes abschließen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 C 1597
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2007 bis 30.04.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 120.265,00 EUR	Projektleiter: Pudewills	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel (FKZ 02C1577), IfG Leipzig (02C1587), FZ Karlsruhe (02C1597), Universität Hannover (02C1607) und TU Clausthal (02C1617) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Einlagerung von gefährlichen Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Dieses Folgevorhaben setzt inhaltlich das Verbundprojekt "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) fort. Im Folgevorhaben führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem 3D-Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einem realen Untertagebauwerk im Steinsalz durch. Dabei wird auch die Permeabilitätsentwicklung in der Auflockerungszone einbezogen sowie eine Langzeitextrapolation des mechanischen Verhaltens vorgenommen. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Start-Workshop der Projektpartner
- AP2: Planung und Durchführung des untertägigen Bohr- und Messprogramms sowie der Laboruntersuchungen
- AP3: Vorbereitung der Modellrechnungen einschließlich der Bestimmung von salztypspezifischen Kennwerten für die Stoffgesetzparameter
- AP4: 3D-Modellberechnungen eines untertägigen Grubenausschnitts mit FEM / FDM
- AP5: Erstellung von Ergebnisberichten durch die Projektpartner
- AP6: Vergleich der Stoffgesetze, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen, Ausarbeitung von Empfehlungen
- AP7: Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner
- AP8: Durchführung eines öffentlichen Ergebnis-Workshops
- AP9: Schriftliche Dokumentation der Ergebnisse (Abschlussbericht und Veröffentlichung)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Institut für Nukleare Entsorgung (INE) beteiligt sich an dem aktuellen Verbundprojekt mit dem Finiten Elementen Rechenprogramm ADINA und mit dem im ersten Teil des Vorhabens entwickelten Stoffmodell für Steinsalz.

Die im Berichtszeitraum durchgeführten Arbeiten lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Die umfangreichen Berechnungen zu der gemeinsamen Studie der Projektpartner zum Einfluss der Modelldiskretisierung auf Simulationsergebnisse wurden nun mit korrekter Belastungsgeschwindigkeit von $1E-05$ 1/s wiederholt. Durch das Löschen nach dem Bruch stark entfestigter Elemente wurden Stoßausbrüche simuliert. Die gesamten Rechenergebnisse der Studie wurden nochmals an den Koordinator in passendem Format geleitet. Ein Vergleich der relevanten Ergebnisse der Pfeilerstudie wurde im Rahmen des 7. Workshops dargestellt. Diese Studie ergab, dass das ursprüngliche 3D-Modell des Grubenausschnitts Angersdorf im Nahbereich der Hohlräume wesentlich feiner diskretisiert werden muss. Zum Beispiel sollte der hoch belastete Pfeiler mit mindestens 8 Elementen in der Pfeilerhöhe und mindestens 10 Elementen pro halbe Pfeilerbreite diskretisiert werden, um die Pfeilerstandzeit zuverlässig vorhersagen zu können.
- In einem weiteren Arbeitsschritt wurde das 3D-Modell des Grubenausschnitts nochmals verfeinert und der Anfangsspannungszustand im Modell sowohl unter Annahme eines elastischen Verhaltens aller Schichten als auch unter Berücksichtigung des Kriechverhaltens des Salzes und des Salztons berechnet. Anschließend wurde die Auffahrung der untertägigen Hohlräume vorgenommen.
- Die Auswertung der neueren Laborversuchsergebnisse des IfG und der TUC wurden weitergeführt. Ziel dieser Arbeit ist es, die bereits verwendeten Stoffmodellkennwerte an die Messdaten von Steinsalz der Grube Angersdorf anzupassen.

Die jeweiligen Rechenergebnisse sowie die Ergebnisvergleiche wurden auf dem 6. und 7. Projektworkshop im März und Juni 2009 präsentiert und diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr 2009 wird der Zuwendungsempfänger die Kriechsimulationsrechnungen mit dem Modell des Grubenausschnitts Angersdorf bis 50 Jahre (Zustand „heute“) und 100 Jahre nach der Auffahrung der untertägigen Hohlräume weiterführen. Außerdem ist ein Abschlussbericht zu erstellen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Pudewills, A. (2007): Modeling of hydro-mechanical behavior of rock salt in the near field of repository excavations, Proc. of the Mechanical Behavior of Salt -Understanding of the THMC Processes in Salt-, M. Wallner, K.-H. Lux, W. Minkley, & H.R. Hardy, Jr. (eds), Taylor & Francis Group, London, pp 195-200, ISBN-0-415-44398-2
- 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
- O. Schulze, U. Heemann, F. Zetsche, A. Hampel, R. Günther, W. Minkley, K. Salzer, A. Pudewills, R. Rokahr, D. Zapf, Z. Hou, R. Wolters & U. Düsterloh (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. – Proc. of the Mechanical Behavior of Salt -Understanding of the THMC Processes in Salt-, M. Wallner, K.-H. Lux, W. Minkley, & H.R. Hardy, Jr. (eds), Taylor & Francis Group, London, pp 77-88, ISBN-0-415-44398-2
- Pudewills, A. (2007): Numerical investigation of the long-term evolution of the excavation disturbed zone, Proc. Int. Conf. on Rad. Waste Disposal in Geological Formations, Braunschweig, 6.-9. Nov. 2007, eds. W. Brewitz and U. Kleemann, pp 164-171, GRS - S - 49

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 C 1607
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 4		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2007 bis 30.04.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 132.635,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Rokahr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel (FKZ 02C1577), IfG Leipzig (02C1587), FZ Karlsruhe (02C1597), Universität Hannover (02C1607) und TU Clausthal (02C1617) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Einlagerung von gefährlichen Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern.

Dieses Folgevorhaben setzt inhaltlich das Verbundprojekt "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) fort. Im Folgevorhaben führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem 3D-Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einem realen Untertagebauwerk im Steinsalz durch. Dabei wird auch die Permeabilitätsentwicklung in der Auflockerungszone einbezogen sowie eine Langzeitextrapolation des mechanischen Verhaltens vorgenommen. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Start-Workshop der Projektpartner
- AP2: Planung und Durchführung des untertägigen Bohr- und Messprogramms sowie der Laboruntersuchungen
- AP3: Vorbereitung der Modellrechnungen einschließlich der Bestimmung von salztypspezifischen Kennwerten für die Stoffgesetzparameter
- AP4: 3D-Modellberechnungen eines untertägigen Grubenausschnitts mit FEM / FDM
- AP5: Erstellung von Ergebnisberichten durch die Projektpartner
- AP6: Vergleich der Stoffgesetze, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen, Ausarbeitung von Empfehlungen
- AP7: Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner
- AP8: Durchführung eines öffentlichen Ergebnis-Workshops
- AP9: Schriftliche Dokumentation der Ergebnisse (Abschlussbericht und Veröffentlichung)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im aktuellen Berichtszeitraum wurden durch den Zuwendungsempfänger Testrechnungen mit dem neu implementierten Stoffgesetz IUB-MDCF wie geplant durchgeführt. Der Vergleich der mit Flac3D erzeugten Berechnungsergebnisse mit entsprechenden analytischen Berechnungsergebnissen ergab, dass die mathematische Umsetzung des Stoffgesetzes IUB-MDCF im Programmsystem Flac3D korrekt ist.

Nachfolgend wurde das im Rahmen des Verbundvorhabens zu behandelnde Modell der Grube Angersdorf mit folgenden Optionen berechnet und verglichen:

- viskose Berechnung über einen Zeitraum von 100 Jahren nur unter Berücksichtigung der Versetzungsmechanismen (transienter und sekundärer Kriechanteil ohne Berücksichtigung des Schädigungsanteils des Stoffgesetzes IUB-MDCF) mit und ohne Ansatz der Theorie großer Verformungen,
- viskose Berechnung über einen Zeitraum von ca. 75 Jahren unter Berücksichtigung der Schädigungsentwicklung aus Schubspannungen mit Ansatz der Theorie großer Verformungen.

Diese Vergleichsrechnungen dienen der Plausibilitätsprüfung der Ergebnisse komplexer Berechnungsmodelle. Darüber hinaus wurde eine Anpassung der stationären Kriechrate durch die Aktivierung des zweiten Kriechmechanismus vorgenommen. Die Ergebnisse und Arbeiten wurden auf dem 6. Workshop im März in Hannover vorgestellt.

Wie auf den 6. Workshop beschlossen, wurden verschiedene Berechnungen des Primärspannungszustandes wie folgt durchgeführt:

- elastische Berechnung des Primärspannungszustandes,
- elastische Berechnung des Primärspannungszustandes mit anschließender Kriechphase über einen Zeitraum von 100 Jahren.

Die Ergebnisse aller Projektpartner wurden auf dem 7. Workshop im Juni in Leipzig verglichen. Nach der elastischen und viskosen Berechnung des Primärspannungszustandes wurden die Hohlräume im Modell erstellt und der Sekundärspannungszustand zum Zeitpunkt t_0 elastisch berechnet. Nachdem ein Gleichgewichtszustand des Modells berechnet worden war, wurde die Kriechberechnung gestartet. Aufgrund der sensiblen Zeitschrittsteuerung des Stoffgesetzes im Programmsystem Flac3D lag der Simulationszeitpunkt bei rund 1,6 Jahren nach einer realen Rechenzeit von 4 Wochen. Ein zu groß gewählter Zeitschritt führt im Programm zu numerischen Schwierigkeiten. Die Firma Itasca arbeitet zum Zeitpunkt der Berichtserstellung an der Behebung der numerischen Probleme. Parallel dazu werden Berechnungen mit kleineren Modellen durchgeführt und mit Berechnungen des zweidimensionalen FEM- Programm UT2D verglichen. Auf der Grundlage dieser Berechnungsergebnisse ist eine Bewertung der Ergebnisse des Modells Grube Angersdorf durch den Zuwendungsempfänger möglich.

4. Geplante Weiterarbeiten

Es werden weitere Testrechnungen mit komplexeren Modellen durchgeführt, um eine bessere Einschätzung der Ergebnisse vornehmen zu können. Parallel dazu wird die Generierung des Modells Angersdorf überarbeitet, um die Zonen und Knotenanzahl zu reduzieren. Dadurch kann eine Beschleunigung der Berechnung erreicht werden. Die überarbeitete Stoffgesetzversion wird Plausibilitätskontrollen unterzogen. Weiterhin werden Modellrechnungen an komplexeren Modellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden mit den Resultaten eines zweidimensionalen FEM- Programms verglichen. Des Weiteren werden die festgelegten Berechnungen mit dem Modell Angersdorf durchgeführt, ausgewertet und auf den nächsten Workshops vorgestellt. Abschließend wird mit der Anfertigung des Einzelberichts begonnen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zum IUB-MDCF Stoffgesetz und zum Vorgängerprojekt:

- 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. *)
- *) In: K.-H. Lux, W. Minkley, M. Wallner & H.R. Hardy, Jr. (Hrsg.): Basic and Applied Salt Mechanics; Proc. of the Sixth Conf. on the Mechanical Behavior of Salt (Saltmech 6), Hannover, Mai 2007, Taylor & Francis (A.A. Balkema Publ.), Lisse.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1617
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2007 bis 30.04.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 187.145,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel (FKZ 02C1577), IfG Leipzig (02C1587), FZ Karlsruhe (02C1597), Universität Hannover (02C1607) und TU Clausthal (02C1617) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertageeinlagerung von gefährlichen Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern.

Dieses Verbundvorhaben schließt sich inhaltlich an das BMBF-Verbundvorhaben „Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen“ an. Auch in diesem Folgevorhaben sollen in enger Kooperation mit den Projektpartnern Erfahrungen auf dem Gebiet der Salzmechanik ausgetauscht werden. Anhand von 3D-Benchmark-Modellberechnungen untersucht jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem die Phänomene Kriechen, Dilatanz, Schädigung, Bruch, Nachbruchverhalten und Permeabilitätsentwicklung in einem realen Untertagebauwerk im Steinsalz und führt eine Langzeitextrapolation des mechanischen Verhaltens durch. Das Projekt dient einer realistischeren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf ihren Einsatz bei der praktischen Anwendung zur Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Start-Workshop
- AP2: Planung und Durchführung des untertägigen Bohr- und Messprogramms sowie der Laboruntersuchungen
- AP3: Vorbereitung der Modellrechnungen einschließlich Bestimmung von salztypspezifischen Kennwerten für die Stoffgesetzparameter
- AP4: 3D-Modellrechnungen mit FEM / FDM
- AP5: Erstellung von Einzelberichten durch die Projektpartner
- AP6: Vergleich der Stoffgesetze, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen, Ausarbeitung von Empfehlungen
- AP7: Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner
- AP8: Durchführung eines Ergebnis-Workshops
- AP9: Schriftliche Dokumentation der Projekt-Ergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Der Start-Workshop wurde im August 2007 durchgeführt.
- AP2: Die beim Projektpartner TUC geplanten Festigkeitsversuche wurden vollständig durchgeführt, ebenso ein Kriechversuch mit 5 Laststufen (Gesamtversuchsdauer über 220 Tage), d. h. der Versuch enthält eine Stufe mehr als in der Planung angesetzt. Dabei sind einige Stufen auch wesentlich länger durchgeführt worden als in der Planung angesetzt.
- AP3: Sowohl die Modelldiskretisierung als auch die Bestimmung der Stoffmodellkennwerte sind bereits im vorhergehenden Berichtszeitraum abgeschlossen worden.
- AP4: Zusätzlich zu den 3D-Modellrechnungen des Grubenausschnittes Angersdorf ist seit dem 4. Workshop die Nachrechnung einer Diskretisierungsstudie am Beispiel eines ebenen Langpfeilermodells vorgesehen. Diese Berechnungen sind im betrachteten Berichtszeitraum mit den aktuellen Parametern durchgeführt worden.
- AP5: Mit der Erstellung des Einzelberichts ist im vorliegenden Berichtszeitraum begonnen worden.
- AP6: Keine.
- AP7: Der 6. Workshop wurde im März 2009 durchgeführt. Weitere Labordaten und die Nachrechnung der Diskretisierungsstudie wurden vorgestellt.
Der 7. Workshop wurde im Juni 2009 durchgeführt. Weitere Labordaten sowie die Berechnungsergebnisse der 3D-Modellrechnung des Grubenausschnittes Angersdorf wurden vorgestellt. Es hat sich gezeigt, dass die für den vereinbarten Simulationszeitraum notwendige Rechenzeit für das 3D-Modell sehr groß ist.
- AP8: Keine.
- AP9: Keine.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Der Start-Workshop ist abgeschlossen.
- AP2: Aufgrund der sehr großen Versuchszeit bei dem durchgeführten Kriechversuch ist ein zweiter mehrstufiger Kriechversuch mit geänderten Belastungsrandbedingungen nicht mehr vorgesehen. Der geplante Kriechbruchversuch mit einer Laststufe, in der transientes, stationäres und tertiäres Kriechen zu beobachten sein soll, wird noch immer durchgeführt, da bisher auch nach einer Versuchszeit von einigen Monaten noch kein tertiäres Kriechen zu beobachten ist.
- AP3: Weitere vorbereitende Arbeiten sind nicht vorgesehen.
- AP4: Weitere Durchführung der geplanten 3D-Modellrechnung am Grubenausschnitt Angersdorf.
- AP5: Erstellung des Einzelberichts.
- AP6: Vergleich der Stoffmodelle, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen sowie Ausarbeitung von Empfehlungen.
- AP7: Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner zur Darstellung und Diskussion wichtiger Zwischenergebnisse.
- AP8: Durchführung eines Ergebnis-Workshops.
- AP9: Erstellung eines Abschlussberichts und einer Veröffentlichung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
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

1. Projektmanagement
2. Datenbank
3. Schnittstellen
4. Datenerfassung
5. Datenbewertung
6. Qualitätsmanagement
7. Dokumentation
8. Thermodynamische Datenbasis für Phosphat

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Projektmanagement: Koordination des Gesamtvorhabens
- Datenbank: Ausgehend von der vorab erstellten Dokumentation der Datenbank wurden erste Skripte in der Sprache plpgsql entworfen, einige von ihnen wurden bereits implementiert. Das Ziel ist es, Eingaben der Anwender nach bestimmten Kriterien zu prüfen, die mit reiner Datenbanklogik allein nicht implementierbar sind. Diese Überprüfung ist ein wesentliches Element der Qualitätssicherung in THEREDA.
- Schnittstellen:
 - Planung eines Programms zum Auslesen von Daten aus der Datenbank sowie einer Rahmen-Web-Applikation für THEREDA
 - Vergabe eines Unterauftrages an die Firma LINEAS
- Datenerfassung: -
- Datenbewertung: -
- Qualitätsmanagement: -
- Dokumentation: -
- Thermodynamische Datenbasis für Phosphat: Es wurde eine detaillierte Literaturrecherche durchgeführt, bei der etwa 150 relevante Veröffentlichungen, zusätzlich zu über 200 schon in der GRS internen Datenbank vorhandenen, gefunden wurden. Insgesamt decken die Veröffentlichungen die Jahre von 1880 bis 2005 ab. Bei der Auswertung wurde sich zunächst auf Systeme, die Natrium und Kalium enthalten, konzentriert. Im Labor wurden Vorbereitungen getroffen, so dass jetzt mit isopiesticen Versuchen begonnen werden kann.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Datenbank: Implementierung und Erprobung der Skripte
- Schnittstellen: Begleitung der Arbeit von LINEAS, Test der ausgelieferten Programme
- Thermodynamische Datenbasis für Phosphat:
 - Weitere Auswertung der Literatur; Konzentration auf Wechselwirkung von Phosphat mit Magnesium und Calcium
 - Durchführung von isopiesticen Versuchen in den Systemen Natrium-Phosphat-Chlorid und Kalium-Phosphat-Chlorid sowie Planung von Löslichkeitsversuchen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
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: Die für die Untersuchungen notwendigen Messzellen wurden konzipiert und befinden sich in der Beschaffung. Weiterhin wurden die für die Gasanalysen von sehr geringen Gasmengen in Betracht kommende Analysegerät (GC), das es ermöglicht kontinuierliche Gasanalysen vorzunehmen sowie die zur Kalibration benötigten Gase ausgewählt und beschafft.

AP2: Die für die Untersuchungen notwendigen Diffusionsmesszellen wurden konzipiert und befinden sich in der Beschaffung.

AP3: Mit der Literaturrecherche zum Kenntnisstand über Bentonitbarrieren wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: - Erprobung der Messzellen
- Inbetriebnahme der Gasanalytik
- Durchführung der Versuche zum Gastransport
- Testen des Rechenprogramms (RockFlow)

AP2: - Testen der Diffusions-Messzellen
- Durchführung der Versuche zum Diffusionstransport
- Testen der Rechenprogramme (GeoSys/RockFlow, Geochemist's Workbench)

Die Laboruntersuchungen zum drucklosen Gastransport und zur Schwermetalldiffusion in kompaktierten Bentoniten sind zeitaufwendig. Deshalb sind kombinierte Gas- und Schadstoffdiffusionsexperimente geplant.

AP3: - Weiterführung der Literaturstudie über Bentonitbarrieren für UTD.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

2.3 W-Vorhaben

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Jülich, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 W 6243
Vorhabensbezeichnung: Institutionelle und technologische Weiterentwicklung von internationalen Kernmaterialkontrollen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Kernmaterialüberwachung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2003 bis 30.04.2009	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.04.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.047.262,00 EUR	Projektleiter: Dr. Richter	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen der Vorhaben 02W6184 und 02W6218 auf und zielt ab auf Lösungsvorschläge zur Implementierung des Zusatzprotokolls, Entwicklung von anlagen- und brennstoffkreislaufspezifischen Kontrollmethoden sowie Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden im Rahmen der Proliferationsresistenz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Programmpunkte und Arbeitspakete sind:

- die Entwicklung von Prozeduren für die Durchführung von Complementary Access, Managed Access sowie Unannounced Inspections,
- die Erarbeitung qualitativer Kriterien zur Inspektionsplanung von IAEO und Euratom und zur Bewertung der Inspektionsergebnisse,
- die Erarbeitung von Vorschlägen zu zukünftigen Betreiberpflichten,
- die Zusammenarbeit mit ESARDA,
- die Entwicklung von Komponenten für Unattended Remote Monitoring and Measurement Systems,
- die Entwicklung von Methoden der Fernerkundung,
- die Bearbeitung von Fragen zur nuklearen Abrüstung,
- die Entwicklung von zerstörungsfreien Methoden zur Verifizierung abgebrannter Brennelemente in kraftwerksstandortnahen Zwischenlagern,
- die Erarbeitung von Kriterien zur Beendigung der Kontrollen,
- die Untersuchung und Bewertung geophysikalischer Methoden für die Überwachung der geologischen Endlagerung abgebrannter Brennelemente,
- die Definition von Kriterien zur Proliferationsresistenz und
- die Analyse von technischen, institutionellen und politischen Ansätzen zur Stärkung der Nichtverbreitung.

Die Arbeiten erfolgen im internationalen Kontext nach vorgegebenen Zeitplänen von BMWi, Euratom und IAEO, parallel laufend und unter Einbeziehung in internationale Diskussionen.

Sie zielen 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

- Standortlager: Mit IAEO, Euratom und Betreibern Diskussion der geplanten Safeguards-Techniken für die Standortlagerung abgebrannter Brennelemente.
- Datenfernübertragung: Fortsetzung der Diskussion des von Euratom vorgeschlagenen technischen Ansatzes in Abstimmung mit den Betreibern und BMWi.
- ESARDA: Leitung und Mitarbeit in der Arbeitsgruppe „Integrated Safeguards“, Mitarbeit in den Arbeitsgruppen „Containment and Surveillance“ und „Verification Technologies and Methodologies“, Dokumentation einer Bewertungsmethode für Containment and Surveillance-Techniken, Mitarbeit im Editorial Committee; Diskussion und Bewertung von Unannounced Inspections; Programmplanung für die ESARDA-Jahrestagung 2009.
- Unattended Systems: Prototyp-Entwicklung für das IAEA Next Generation Surveillance System (NGSS), dazu Projektsitzung und Telefonkonferenzen.
- Zusatzprotokoll und Implementierung von Safeguards gemäß Euratom-Vertrag: Unterstützung von BMWi und Betreibern bei ihren Deklarationspflichten und bei der Umsetzung der Euratom-Verordnung 302/2005, Dokumentation der Deklarationen, Bewertung von Safeguards in Europa, Mitarbeit in nationalen und internationalen Gremien (z. B. Atomic Questions Group), Evaluierung früherer deutscher Nuklearaktivitäten für „Broader Conclusion“ und „State-level Approach“ der IAEO.
- IAEO-Inspektionsberichte: Elektronische Erfassung und Auswertung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Förderprojekt endete am 30.04.2009.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Jasani, B., Niemeyer, I., Nussbaum, S., Richter, B., Stein, G. (Hrsg.); „International Safeguards and Satellite Imagery – Key Features of the Nuclear Fuel Cycle and Computer-based Analysis“, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2009, ISBN 978-3-540-79131-7, e-ISBN 978-3-540-79132-4, DOI 10.1007/978-3-540-79132-4.
- Jasani, B., Stein, G., Richter, B.; „Non-proliferation and International Nuclear Material Safeguards“ in: „International Safeguards and Satellite Imagery – Key Features of the Nuclear Fuel Cycle and Computer-based Analysis“, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2009, ISBN 978-3-540-79131-7, e-ISBN 978-3-540-79132-4, DOI 10.1007/978-3-540-79132-4.

2.4 BMWi-Hausvorhaben

Zuwendungsempfänger: Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: KWA 9003
Vorhabensbezeichnung: Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2008 bis 31.12.2010	Berichtszeitraum: 01.01.2009 bis 30.06.2009	
Gesamtkosten des Vorhabens: 935.030,00 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 Basis bzw. in Anlehnung an bestehende WTZ-Abkommen, wie z. B. mit Russland, erfolgen.

Das Vorhaben hat die Koordinierung und Intensivierung der Arbeiten deutscher Wissenschaftler in den auf die "alternativen Wirtsgesteine" Ton/Tonstein und Granit ausgerichteten internationalen Forschungsprogrammen zum Ziel.

Die von BMWi geförderten Vorhaben werden ausführlicher in den formalisierten Zwischenberichten in Kapitel 2.1 beschrieben. Die BGR und das FZK/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 02E10437, 02E10669, 02E10679, FZK/INE, BGR)

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

(Vorhaben 02E9894, 02E10045, 02E10116, 02E10377, 02E10427, 02E10437, 02E10508, 02E10618, FZK/INE, BGR)

Schwerpunkte der Arbeiten, die sowohl In-situ- als auch Labor-Untersuchungen umfassen, sind Untersuchungen von THM(C)-Fragestellungen, 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.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Vorhaben sind eingebunden in internationale Projekte und werden zum Teil von der Europäischen Kommission im Rahmen des FP6 und 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 der Methoden zur Messung des Aufsättigungsverhaltens des technischen Barriersystems, der physikalischen und chemischen Parameter mit Geoelektrik und faseroptischer Sensoren, Messung der jeweiligen Parameter und Einsatz in gekoppelten numerischen Modellen
- Numerische Modellierung und Laboruntersuchungen zum 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 (Heater Experiment, Ventilations-Test, SB-Experiment), Tournemire

- 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 📖 66 |
| Bauhaus-Universität Weimar, Geschwister-Scholl-Straße 8, 99423 Weimar | |
| 02 E 10437 | Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen 📖 90 |
| Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Konrad-Wachsmann-Allee 1, 03046 Cottbus | |
| 02 C 1466 | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrologie und Geochemie des Gesamtsystems 📖 178 |
| Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover | |
| 02 C 1476 | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 2 (BGR): Geophysikalische Untersuchungen, Seismische Erkundung, Geologisches 3D-Modell, Bohrungen, Server-Datenbank, Koordination des Gesamtvorhabens 📖 180 |
| DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine | |
| 02 E 9854 | Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern, Machbarkeitsstudie und Entwurfs- und Konzeptplanung (DENKMAL, Phase 1) 📖 14 |
| 02 E 10065 | Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW - Kurztitel: ISIBEL 📖 28 |
| 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- 📖 32 |
| 02 E 10246 | Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU) 📖 58 |
| 02 E 10407 | Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX 📖 84 |
| 02 E 10487 | Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm 📖 100 |
| 02 E 10508 | Machbarkeitsstudie zur Vorbereitung eines 2-Bohrloch-Erhitzerversuches im URL Mont Terri, Schweiz „MACH-2“ 📖 104 |

- 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)  130

- 02 E 10649 Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA)  132

DHI-WASY GmbH, Waltersdorfer Str. 105, 12526 Berlin

- 02 C 1516 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung  188

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

- 02 C 1577 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1  198

Eberhard-Karls-Universität Tübingen, Wilhelmstraße 7, 72074 Tübingen

- 02 C 1295 Kopplung Numerischer Modelle für C:HM - Transportprozesse, Teilprojekt Uni Tübingen: Validierung Numerischer Modelle für geochemische Prozesse in geotechnischen Dichteelementen  158

Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V. (FZD), Bautzner Landstraße 400 (B6), 01328 Dresden

- 02 C 1436 Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD  172

- 02 E 10136 Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD  38

- 02 E 10156 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton  42

- 02 E 10528 Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2  108

- 02 E 10618 Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden  126

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

- 02 E 10357 Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern  74

- 02 W 6243 Institutionelle und technologische Weiterentwicklung von internationalen Kernmaterialkontrollen  214

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Postfach 36 40, 76021 Karlsruhe

- 02 C 1597 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3  202

- 02 E 10126 Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZ Karlsruhe  36

- 02 E 10206 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere  52
- 02 E 10679 Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2  138

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

- 02 E 10316 Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen  68
- 02 E 10578 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP3 - Kurztitel: A-DuR  118

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

- 02 C 1244 Prognose der Redoxeigenschaften natürlicher wässriger Lösungen  148
- 02 C 1254 Geochemische Barriereeffizienz im anaeroben Deponienahfeld einer UTD  150
- 02 C 1285 Kopplung Numerischer Modelle für C:HM - Transportprozesse, Teilprojekt GRS  156
- 02 C 1426 Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS  170
- 02 C 1628 Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Phase 2, Kurztitel: WeDa-II  208
- 02 C 1638 Bentonit als Barrierematerial für den Abschluss von Untertagedeponien - Abschließende Versuche und eine Zusammenstellung von Wissenschaft und Technik (Kurztitel: Bentonit-Barrieren)  210
- 02 E 9894 Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptprojekt  16
- 02 E 9944 Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2  18
- 02 E 9995 Grundlegende Prozesse zum Radionuklidtransport im Fernfeld eines Endlagers im Salz – FUNMIG-RTDC-5  20
- 02 E 10045 Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure  24
- 02 E 10055 Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL  26
- 02 E 10075 Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90  30
- 02 E 10116 Barriereintegrität des einschlusswirksamen Deckgebirges in Tonformationen (BET)  34
- 02 E 10146 Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS  40

- 02 E 10236 Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)  56
- 02 E 10276 Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM-  62
- 02 E 10336 Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t  72
- 02 E 10367 Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen  76
- 02 E 10377 Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen  78
- 02 E 10387 Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX  80
- 02 E 10477 Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm  98
- 02 E 10498 Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz (Vorprojekt) – Kurztitel: VIRTUS  102
- 02 E 10518 Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1  106
- 02 E 10538 Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen - Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit  110
- 02 E 10548 Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern  112
- 02 E 10558 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP1 - Kurztitel: A-DuR  114
- 02 E 10608 Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa  124
- 02 E 10669 Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2  136

GTS Grube Teutschenthal Sicherungs GmbH & Co. KG, Straße der Einheit 9, 06179 Teutschenthal

- 02 C 1204 Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leichtlöslichen Salzgestein (Carnallit); Teil 2: Erprobung von Funktionselementen in situ  146

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  120

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

- 02 E 10447 Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilität  92

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

- 02 C 1264 Beweissicherungsprogramm zum geomechanischen Verhalten von Salinarbarrieren nach starker dynamischer Beanspruchung und Entwicklung einer Dimensionierungsrichtlinie zum dauerhaften Einschluss  152
- 02 C 1587 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2  200
- 02 E 10256 Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)  60
- 02 E 10659 Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge  134

IHU Geologie und Analytik Gesellschaft für Ingenieur- Hydro- und Umwelttechnologie mbH, Dr.-Kurt-Schumacher-Str. 23, 39576 Stendal

- 02 C 1506 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 5 (IHU): Erfassung, Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie  186

Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik, Stilleweg 2, 30655 Hannover

- 02 C 1546 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 9 (GGA-S1): Deckgebirgseigenschaften über einem bergbaubedingt destabilisiertem Untergrund, abgeleitet aus seismischen Beobachtungen  194
- 02 C 1556 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen  196

Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig

- 02 C 1456 Bestimmung der Änderung des räumlichen und zeitlichen Ausbreitungsverhaltens von chemotoxischen Schwermetallen nach Wechselwirkung mit Natural Organic Matter (NOM) in geologischen Formationen von Untertagedeponien  176
- 02 C 1536 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen  192
- 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  46

**Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec) GmbH, Forschungsgelände,
85748 Garching**

- 02 E 10467 Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT  96

Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz

- 02 C 1526 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 7 (JoGU): Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität  190
- 02 E 10166 Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein  44

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  70
- 02 E 10568 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP2 - Kurztitel: A-DuR  116

K-UTEC AG Salt Technologies, Am Petersenschacht 7, 99706 Sondershausen

- 02 C 1395 Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 1  164
- 02 C 1496 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTEC): Grundlagen für Geomodellierung  184

Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover

- 02 C 1607 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 4  204

Materialforschungs- und prüfanstalt an der Bauhaus-Universität Weimar, Coudraystraße 9, 99423 Weimar

- 02 C 1064 Weiterentwicklung eines TDR-Messverfahrens zur Quantifizierung von Feuchte- und Dichteverteilungen in Bentonitversuchsbauwerken  144

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

- 02 E 10397 Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX  82
- 02 E 10628 Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case  128

Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		
KWA 9003	Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine	218
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Regina-Pacis-Weg 3, 53113 Bonn		
02 E 10296	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d ³ f und r ³ t - Visualisierung und Datenanalyse	64
Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg		
02 C 1446	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben TU BAF	174
02 E 10457	Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag	94
Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2A, 38678 Clausthal-Zellerfeld		
02 C 1275	Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse, Teilprojekt TUC: Gekoppelte Modellierung des C:HM Verhaltens von selbstverheilendem Salzversatz	154
02 C 1355	Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des druckbetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht permeables Barrieren-Gebirge (Salinar)	162
02 C 1405	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 2	166
02 C 1415	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 3	168
02 C 1486	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung	182
02 C 1617	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5	206
02 E 10427	Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC	88
02 E 10598	Externer unabhängiger Review des im Vorhaben Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW (ISIBEL) erstellten FEP-Katalogs	122
Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt		
02 E 10015	Untersuchungen zum Gastransport in der Auflockerungszone in einem geologischen Endlager in Tongestein	22

Technische Universität Dresden, Helmholtzstraße 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  86

Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München
--

- 02 E 10186 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien  48

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  50

Universität Karlsruhe (TH), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe

- 02 C 0922 Verschlussystem mit Äquipotenzialsegmenten für die untertägige Entsorgung (UTD und ELA) gefährlicher Abfälle zur Sicherstellung der homogenen Befeuchtung der Dichtelemente und zur Verbesserung der Langzeitstabilität  142

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  54