

**Ableitung der
wirtsgesteinsspezifischen
Temperaturverträglichkeit
von Endlagerkomponenten**

Kristallingestein

Ableitung der wirtsgesteinsspezifischen Temperaturverträglichkeit von Endlagerkomponenten

Kristallingestein

Oliver Czaikowski
Bernd Förster
Matthias Hinze
Kim-Marisa Mayer
Artur Meleshyn
Marvin Middelhoff
André Rübél
Klaus Wieczorek
Jens Wolf

Januar 2024

Anmerkung:

Dieser Bericht wurde von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) im Auftrag der BGE im Rahmen des Vorhabens 45212727 erstellt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei der GRS.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung der GRS wieder und muss nicht mit der Meinung der BGE übereinstimmen.

Deskriptoren

FEP, Grenztemperatur, Langzeitsicherheit, Standortauswahlgesetz

Vorwort

Der vorliegende Bericht enthält neben der Bereitstellung der wissenschaftlichen Grundlagen eine Ableitung einer für die Sicherheit des Endlagers günstigen Temperatur für das Wirtsgestein Kristallin aus Sicht der Langzeitsicherheit des Endlagersystems. Eine Festlegung der Grenztemperatur nach § 27 Abs. 4 StandAG ist ebenso wenig das Ziel dieses Berichtes, wie die Vorgabe einer Temperatur für die Auslegung eines Endlagers im Kristallin.

Während der Erstellungsphase wurden einzelne Arbeitsstände auf Foren und Workshops der Öffentlichkeit präsentiert. Es bleibt anzumerken, dass Temperaturwerte, die auf den entsprechenden Veranstaltungen gezeigt wurden, lediglich einen Zwischenstand dargestellt haben.

Kurzfassung

Beim Standortauswahlverfahren zur Endlagerung hochradioaktiver Abfälle wird nach Vorgabe des § 27 Abs. 4 StandAG in den vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen bisher vorsorglich von einer maximalen Temperatur von 100 °C an der Oberfläche der Abfallbehälter ausgegangen, um mögliche negative Konsequenzen für die Funktionalität der Komponenten des Endlagersystems (ELS) auszuschließen. Dieser Grenzwert wird unabhängig vom jeweiligen Wirtsgestein angenommen, solange noch ausstehende Forschungsarbeiten keine Festlegung der Temperaturgrenze erlauben. Die Entsorgungskommission /ESK 22/ empfiehlt hingegen, die Anforderungen hinsichtlich der Temperaturverteilung und -entwicklung in einem ELS wirtsgesteins- bzw. standortspezifisch zu formulieren.

Ziel des Berichtes ist es, Grundlagen bereitzustellen, um eine Entscheidung, welche wirtsgesteinsspezifischen Grenztemperaturen (bzw. bei der Auslegung festzulegenden Auslegungstemperaturen) in den rvSU zu berücksichtigen sind, zu unterstützen. Diese Entscheidung ist für das Standortauswahlverfahren wichtig, damit potenziell geeignete Standorte nicht aufgrund von § 27 Abs. 4 StandAG aus dem Standortauswahlverfahren ausscheiden. Der Bericht enthält neben der Bereitstellung der wissenschaftlichen Grundlagen eine Ableitung einer für die Sicherheit des Endlagers günstigen Temperatur für das Wirtsgestein Kristallin. Diese Auswertung ist als Beitrag der Autoren zur Diskussion zu den Grenztemperaturen zu verstehen. Die Bewertung wird dabei aus Sicht der Langzeitsicherheit des Endlagersystems durchgeführt und bezieht alle im Endlager ablaufenden Prozesse mit ein.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Anforderungen und Vorgehen.....	3
2	Prüfungsgrundlage	7
2.1	Einlagerungskonzept für das Wirtsgestein Kristallingestein	7
2.2	FEP-Liste.....	9
2.3	Randbedingungen und Prämissen	12
3	Relevanzprüfung	15
3.1	Komponentenspezifische Prüfung	16
3.2	Prozessgruppenspezifische Prüfung.....	18
3.3	Einlagerungskonzeptspezifische Prüfung	21
3.4	Prozessspezifische Prüfung.....	21
4	Priorisierung	23
5	Ableitung von TUF	25
5.1	Primäre TUF	25
5.1.1	Quellen	37
5.1.2	Smektit-Illitisierung.....	38
5.1.3	Wasserdampfeinwirkung.....	39
5.1.4	Quarzzementation	39
5.1.5	Mikrobielle Eisenreduktion	40
5.1.6	Mikrobielle Sulfatreduktion.....	41
5.1.7	Methanogenese	42
5.1.8	Fermentation	42
5.1.9	Karbonatzersetzung.....	43
5.1.10	Mineralumwandlung.....	43
5.1.11	Thermochemische Sulfatreduktion.....	44
5.1.12	Lösungsdruck	44

5.1.13	Gasdruck	45
5.1.14	Mechanisch induzierte H ₂ -Bildung	45
5.1.15	Pyrolyse.....	46
5.1.16	Thermolabile Organika.....	46
5.1.17	CO ₂ -Desorption	47
5.1.18	H ₂ -induzierte Pyrit-Reduktion.....	48
5.1.19	Korrosionsrate durch H ₂ S	48
5.1.20	Versprödungsrate	49
5.1.21	Viskosität	49
5.1.22	Dichte	50
5.1.23	Rückhaltung.....	51
5.1.24	Diffusionskoeffizient.....	51
5.1.25	RN-Konzentration	51
5.1.26	Thermische Osmose.....	52
5.1.27	Bewertung des Wissenstandes zu den primären TUF	52
5.2	Bilanzierungsgrößen.....	55
5.2.1	Porosität	56
5.2.2	Lösungsmenge	59
5.2.3	Gasmenge	60
5.2.4	H ₂ S-Menge	63
5.3	Abgeleitete TUF.....	64
5.3.1	Korrosion	69
5.3.2	Quellfähigkeit.....	70
5.3.3	Fluiddruckänderung	72
5.3.4	Advektion / Dispersion (Lösung)	73
5.3.5	Advektion / Dispersion (Gas)	74
5.3.6	Diffusion (Lösung).....	75
5.3.7	Diffusion (Gas).....	76
6	Ableitung der GTUF	77
6.1	Wichtung	77
6.2	Ableitung der GTUF für einzelne Komponenten.....	79

7	Ableitung des günstigen Temperaturbereichs für das Gesamtsystem	83
7.1	Temperaturverträglichkeit mit den beschriebenen Prämissen	83
7.2	Ausblick und weitere Arbeiten.....	85
	Literatur.....	87
	Abbildungsverzeichnis.....	101
	Tabellenverzeichnis.....	103
	Abkürzungsverzeichnis.....	105

1 Einleitung

Der vorliegende Bericht beschreibt die Methodik zur Ableitung der Temperaturverträglichkeiten von Endlagerkomponenten bei der Einlagerung hochradioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Kristallingestein. Zusätzlich zu diesem Bericht zum Wirtsgestein „Kristallingestein“ wurden ebenfalls Temperaturverträglichkeiten von Endlagerkomponenten für die Wirtsgesteine „Tongestein“ /CZA 24a/ und „Steinsalz“ /CZA 24b/ abgeleitet.

1.1 Motivation

Basierend auf den Diskussionen und den Empfehlungen der Kommission Lagerung hochradioaktiver Abfallstoffe /KOM 16/ enthält § 27 Abs. 4 StandAG eine Vorgabe für die in den vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen (vSU) zugrunde zu legenden Annahmen hinsichtlich der Temperaturverträglichkeit der Wirtsgesteine: „Solange die maximalen physikalisch möglichen Temperaturen in den jeweiligen Wirtsgesteinen aufgrund ausstehender Forschungsarbeiten noch nicht festgelegt worden sind, wird aus Vorsorgegründen von einer Grenztemperatur von 100 Grad Celsius an der Außenfläche der Behälter ausgegangen.“

Die Kommission hatte diese Eingrenzung empfohlen, da durch die Temperaturerhöhung aus den hochradioaktiven Abfällen in den technischen und geotechnischen Barrieren sowie dem umgebenden Gebirge Prozesse mit unterschiedlichen negativen oder positiven Konsequenzen für die Endlagersicherheit ausgelöst, beschleunigt oder verstärkt werden können. Diese Auswirkungen gilt es auf Basis des Standes von Wissenschaft und Technik zu prüfen, bevor – begründet auf dieser Prüfung – eine Abweichung von den 100 Grad Celsius an der Außenfläche der Behälter festgelegt werden kann. Diese Abweichung soll laut Kommissionsbericht einen Sicherheitsabstand zwischen der sich tatsächlich einstellenden Temperatur und der Temperatur, bei der kritische Zustände wie schädliche Mineralumwandlungen oder langfristige Schädigungen auftreten können, beinhalten.

Die Entsorgungskommission (ESK) sieht die Festlegung einer wirtsgesteinsunabhängigen Grenztemperatur als nicht zielführend hinsichtlich der sicherheitsrelevanten Auswirkungen des Wärmeeintrages in ein Endlager an und empfiehlt für die Durchführung der repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen (rvSU) auf der Grundlage des jeweiligen vorläufigen Sicherheitskonzepts Anforderungen hinsichtlich der Temperatur-

verteilung und -entwicklung im Endlagersystem wirtsgesteinsspezifisch bzw. standort-spezifisch zu formulieren und das Endlager entsprechend auszulegen /ESK 22/. Werden bei der Auslegung Temperaturen festgelegt, die nicht überschritten werden dürfen, werden diese auch als Auslegungstemperaturen bezeichnet.

Ziel des Berichtes ist es, Grundlagen bereitzustellen, um eine Entscheidung, welche wirtsgesteinsspezifischen Grenztemperaturen (bzw. bei der Auslegung festzulegenden Auslegungstemperaturen) in den rvSU zu berücksichtigen sind, zu unterstützen. Diese Entscheidung ist für das Standortauswahlverfahren wichtig, damit potenziell geeignete Standorte nicht aufgrund von § 27 Abs. 4 StandAG aus dem Standortauswahlverfahren ausscheiden. Der Bericht enthält neben der Bereitstellung der wissenschaftlichen Grundlagen eine Ableitung einer für die Sicherheit des Endlagers günstigen Temperatur für das Wirtsgestein Kristallingestein. Diese Auswertung ist aber als Beitrag der Autoren zur Diskussion zu den Grenztemperaturen zu verstehen.

Eine Festlegung der Grenztemperatur nach § 27 Abs. 4 StandAG ist ebenso wenig das Ziel dieses Berichtes, wie die Vorgabe einer Temperatur für die Auslegung eines Endlagers im Kristallingestein. Die Begriffe „Grenztemperatur“ und „Auslegungstemperatur“ werden daher bei der Analyse der Temperaturverträglichkeiten nicht verwendet. Es ist bei dieser Analyse von einer im Hinblick auf die Temperaturverträglichkeiten der Endlagerkomponenten „günstigen Temperatur“ die Rede. Temperaturverträglichkeit wird dabei im Sinne des Kriteriums zur Bewertung der Temperaturverträglichkeit (gemäß § 24, Anlage 8 Stand AG) verstanden. Dort wird unter diesem Begriff definiert, dass die von Temperaturänderungen infolge der Einlagerung der radioaktiven Abfälle betroffenen Gesteinsformationen so beschaffen sein sollen, dass dadurch bedingte Änderungen der Gesteinseigenschaften sowie thermomechanische Gebirgsspannungen nicht zu einem Festigkeitsverlust und einer Bildung von Sekundärpermeabilitäten im Endlagerbereich führen. Dieses für die geologische Barriere definierte Verständnis von Temperaturverträglichkeit wird im Folgenden auf alle Komponenten in einem Endlagersystem (ELS) übertragen.

Eine sicherheitsgerichtete Diskussion günstiger Temperaturen in einem ELS ist nur bei Kenntnis des Wirtsgesteins und des Endlagerkonzeptes möglich /ESK 22/. Im nachfolgenden Unterkapitel wird daher die zugrunde gelegte technische Auslegung und der geplante Betrieb des Endlagers in einer Kristallingesteinsformation detaillierter beschrieben.

Will man aus den Ergebnissen der Diskussion der Temperaturverträglichkeiten zu geeigneten Temperaturen für die Auslegung eines Endlagers kommen, ist nicht nur die Langzeitsicherheit des Endlagers von Bedeutung, sondern es ist auch ein sicherer Bau und Betrieb des Endlagers im Blick zu behalten. Zudem muss auch berücksichtigt werden, dass die in der EndlSiAnfV geforderte Rückholbarkeit (§ 13) und die geforderte Ermöglichung einer Bergung der eingelagerten Endlagergebäude (§ 14) bei den sich einstellenden Temperaturen im ELS umgesetzt werden können. Da es nicht zielführend ist, langzeitrelevante Temperaturverträglichkeiten mit Fragen der Betriebssicherheit der Rückholung bzw. Bergung innerhalb einer Analyse zu verzahnen, wird die in diesem Bericht vorgestellte Vorgehensweise zur Ableitung von Temperaturverträglichkeiten Fragen zur Betriebssicherheit, der Rückholung oder der Bergung nicht berücksichtigen.

1.2 Anforderungen und Vorgehen

Damit die Ableitung günstiger Temperaturen im Sinne des § 1 Abs. 2 StandAG *in einem partizipativen, wissenschaftsbasierten, transparenten, selbsthinterfragenden und lernenden Verfahren* eingesetzt werden kann, sollte die Methodik folgende grundsätzliche Anforderungen erfüllen:

1. **Vollständigkeit:** Der Nachweis einer „Vollständigkeit“ einer Analyse ist für ein komplexes System grundsätzlich nicht möglich. Ziel einer Analyse muss es aber sein, eine nach Stand von Wissenschaft und Technik umfassende Analyse aller bekannten Prozesse durchzuführen.
2. **Transparenz und Nachvollziehbarkeit:** Diese Forderung ist dann umgesetzt, wenn die gewählte Vorgehensweise für Außenstehende a) zugänglich, b) verständlich, und c) selbst veränderbar/ausführbar ist.
3. **Flexibilität:** Die technische Auslegung ist ein wesentliches Element der Optimierung des Endlagersystems (§ 12 EndlSiAnfV). Gerade zu Beginn des Standortauswahlverfahrens ist eine flexible Methode von großer Bedeutung, die Änderungen in der technischen Auslegung relativ einfach und schnell berücksichtigen kann.
4. **Identifizierung von Forschungs- und Entwicklungsbedarf:** Im Rahmen der Ableitung einer günstigen Temperatur sind gemäß § 12 EndlSiAnfV Forschungs- und Entwicklungsbedarfe zu identifizieren und darzustellen sowie hinsichtlich ihrer Sicherheitsrelevanz zu bewerten.

Die Ableitung günstiger Temperaturbereiche in einem ELS erfolgt unter Berücksichtigung dieser Anforderungen in vier Schritten:

1. Relevanzprüfung (Kap. 3): Zerlegung des ELS in seine Komponenten und Eigenschaften sowie die darauf wirkenden Ereignisse und Prozesse (engl. features, events and processes, kurz FEP). Auswahl und Bewertung von sowohl temperaturabhängigen als auch für die thermischen Eigenschaften des ELS bedeutsamen FEP für alle temperaturbeeinflussten Komponenten des zugrunde gelegten Endlagerkonzeptes.
2. Priorisierung (Kap. 4): Bewertung der für eine Bestimmung der Temperaturverträglichkeiten der Komponenten des ELS relevanten Prozesse (bzgl. integritätsrelevanten Eigenschaften der Komponente sowie Auswirkungen auf die radionuklidtransportrelevanten (*RN-transportrelevanten*) Eigenschaften)
3. Überführung der priorisierten Prozesse in Temperaturunverträglichkeitsfunktionen (TUF) (Kap. 5). Durch Minimierung einer Gesamttemperaturunverträglichkeitsfunktion (GTUF) ergibt sich für jede Komponente ein günstiger Temperaturbereich (Kap. 6).
4. Synthese (Kap. 7): Verbal-argumentative Zusammenführung der Ergebnisse und Begründung eines günstigen Temperaturbereichs für das zugrunde gelegte ELS.

Im ersten Schritt wird der Stand von Wissenschaft und Technik zu sicherheitsrelevanten temperaturabhängigen Prozessen im Endlager (insbesondere basierend auf den Ergebnissen aus /BRA 19/) durch die Analyse einer FEP-Liste in Beziehung zu einem Endlagerkonzept gesetzt. Für die relevanten Prozesse wird im zweiten Schritt festgestellt, wie wichtig der Einfluss auf die Temperaturverträglichkeit der Komponenten des ELS ist und wie die tendenzielle Ausprägung der Temperaturabhängigkeit priorisierter Prozesse aussieht (vergleichbar mit dem Vorgehen in /BRA 19/, Kap. 6). Die im dritten Schritt genannte Vorgehensweise beinhaltet eine quantitative Einschätzung der Temperaturabhängigkeit priorisierter Prozesse und erweitert damit die Erkenntnisse aus /BRA 19/. Durch Einführung von Temperaturunverträglichkeitsfunktionen (TUF) wird die Ermittlung günstiger Temperaturen als (mathematisches) Entscheidungsproblem formuliert. Dabei ist unter dem Begriff der Temperaturunverträglichkeitsfunktion eine skalare nichtnegative Funktion der Temperatur ϑ zu verstehen, die je nach Prozess und betrachtetem Aspekt bei günstigen Temperaturen kleine Funktionswerte und bei ungünstigen Temperaturen große Funktionswerte annimmt. Jeder Prozess bzw. seine TUF beschreibt dabei eine Dimension des Entscheidungsproblems. Um unter Berücksichtigung aller relevanter

Prozesse eine günstige Temperatur zu finden, wird eine Gesamttemperaturunverträglichkeitsfunktion (GTUF) als gewichtete Summe der TUF ermittelt, woraus sich eine günstige Temperatur bzw. ein günstiger Temperaturbereich bzgl. Integrität sowie RN-Transport für jede Komponente ergibt.

Als Definitionsintervall der TUF wird der Temperaturbereich zwischen 35 °C und 250 °C betrachtet. Die untere Grenze von 35 °C wird als Gebirgstemperatur interpretiert, welche im ELS (unter Ausschluss von Frostprozessen) nicht unterschritten werden kann. Bei der Wahl der oberen Grenze wurden im ELS Prozesse berücksichtigt, die bei sehr hohen Temperaturen auftreten und integritätsrelevante Eigenschaften des ewG beeinträchtigen, d. h. die Grenze von 250 °C wurde aufgrund der Kristallwasserfreisetzung von Polyhalit, welche oberhalb von 230 °C beginnt /JOC 81/, /ROT 86/, /KUH 13/ festgelegt. Diese obere Grenze wurde für das Wirtsgestein Steinsalz abgeleitet, wird aber zur Wahrung eines konsistenten Ansatzes über alle Wirtsgesteine auch auf Ton- und Kristallin-gestein übertragen.

Insgesamt ermöglicht das vorgestellte Verfahren eine transparente und adaptive Festlegung günstiger Temperaturen in den Komponenten eines ELS. Die Methode wurde im Rahmen dieses Projektes in ein computergestütztes Rechenprogramm umgesetzt, so dass innerhalb kurzer Zeit durch begründete Anpassungen von TUF und Gewichten die günstigen Temperaturbereiche präzisiert werden können. Dies ermöglicht insbesondere eine Berücksichtigung neuer Erkenntnisse zu relevanten Prozessen oder geänderter Ausprägungen der Prozesse in Abhängigkeit vom jeweiligen Endlagerkonzept.

Die detaillierte Vorgehensweise wird in den folgenden Unterkapiteln beschrieben.

2 **Prüfungsgrundlage**

Im Allgemeinen umfasst die Prüfungsgrundlage ein Einlagerungskonzept, die FEP-Liste und verschiedene Randbedingungen und Prämissen. Im Gegensatz zu der FEP-Liste sind das Einlagerungskonzept und die Randbedingungen sowie Prämissen wirtsgesteinsspezifisch.

2.1 **Einlagerungskonzept für das Wirtsgestein Kristallingestein**

In einem Endlagersystem im Kristallin kann der sichere Einschluss der radioaktiven Abfälle grundsätzlich durch zwei Konzeptansätze erreicht werden (§ 4 Abs. 3 EndlSiAnfV):

1. Endlagertyp 1: Durch die Ausweisung (eines oder) mehrerer einschlusswirksamer Gebirgsbereiche als wesentliche geologische Barriere.
2. Endlagertyp 2: Durch technische und geotechnische Barrieren als wesentliche Barrieren, die über den Betrachtungszeitraum von 1 Mio. Jahre bestehen¹.

Die der Analyse einer günstigen Temperatur zugrunde liegende vorläufige² technische Auslegung des Endlagers basiert auf dem Konzept der Bohrlocheinlagerung von Kupfer-Behältern gemäß dem Endlagertyp 2. Die Ausführungen zu Auslegung und Betrieb des Endlagers sind aus /JOB 21/ und /BGE 22/ übernommen.

An die Gesteinsformation des Einlagerungsbereiches werden in diesem Konzept geringere Anforderungen gestellt als an einen ewG. Stattdessen gewährleisten die technischen und geotechnischen Barrieren den Einschluss und die Rückhaltung im Einlagerungsort. Dennoch sollen lokal Gebirgsbereiche für die Einlagerung ausgewählt werden, die eine vergleichsweise geringe hydraulische Durchlässigkeit und hohe mechanische Stabilität aufweisen. Werden größere hydraulisch wirksame Klüfte bei der Auffahrung der Strecken und Schächte durchörtert, ist vorgesehen, diese Bereiche mit speziellen Kluftverschlüssen zu versehen /JOB 21/.

¹ Endlagertyp 2 ist dem Endlagertyp 1 nachgestellt. Er kommt gemäß § 23 Abs. 1 i. V. m. Abs. 4 StandAG und § 4 Abs. 3 EndlSiAnfV ausschließlich für kristalline Wirtsgesteine in Frage, für die kein ewG ausgewiesen werden kann.

² Durch /BGE 22/ erfolgte keine Festlegung auf ein Referenzkonzept. Beispielsweise ist auch die Wahl eines Behälterwerkstoffs (z.B. Kupfer oder Keramik) nicht erfolgt. Daher wird hier das dem Forschungsprojekt CHRISTA-II zugrunde gelegte modifizierte KBS-3-Konzept herangezogen.

Das zugrunde gelegte modifizierte KBS-3-Konzept (mKBS-3) sieht eine Einlagerung von ausgedienten Brennelementen sowie Wiederaufarbeitungsabfällen in rückholbaren Kokillen in vertikalen kurzen Bohrlöchern vor. Der Behälter als wesentliche Barriere besteht aus einer Brennstab-Kokille (BSK-RCu), mit einem Abfallgebindevolumen von 1 m³, die durch 50 mm Kupfer ummantelt wird (Abb. 2.1). Für Handhabung und Transport des nicht abgeschirmten Behälters ist ein Transferbehälter erforderlich. Der Stahlbehälter steht den mechanischen Belastungen entgegen, während die Kupferhülle einen Korrosionsschutz bieten soll /JOB 21/.



Abb. 2.1 Brennstabkokille mit Kupferhülle, beladen mit 3 CSD-V /JOB 21/

Der tonhaltige Versatz (z. B. Ca-Bentonit) umgibt den Behälter und soll dessen Einschlußfunktion unterstützen, indem eine Migration von Lösung minimiert wird, sowie mechanische Einwirkungen und mikrobielle Prozesse reduziert werden. Das Versetzen erfolgt sukzessive: zuerst wird Bentonit innerhalb des Einlagerungsbohrlochs eingebracht und dann wird der Hohlraum um ein Endlagergebilde herum direkt nach dessen Einlagerung verfüllt. Die Einbautrockendichte des Bentonits beträgt mindestens 1750 g/cm³. Das Bohrlochwiderlager, bestehend aus Festgesteinblöcken, steht dem Quelldruck des Versatzes entgegen und schützt so seine Funktion /JOB 21/.

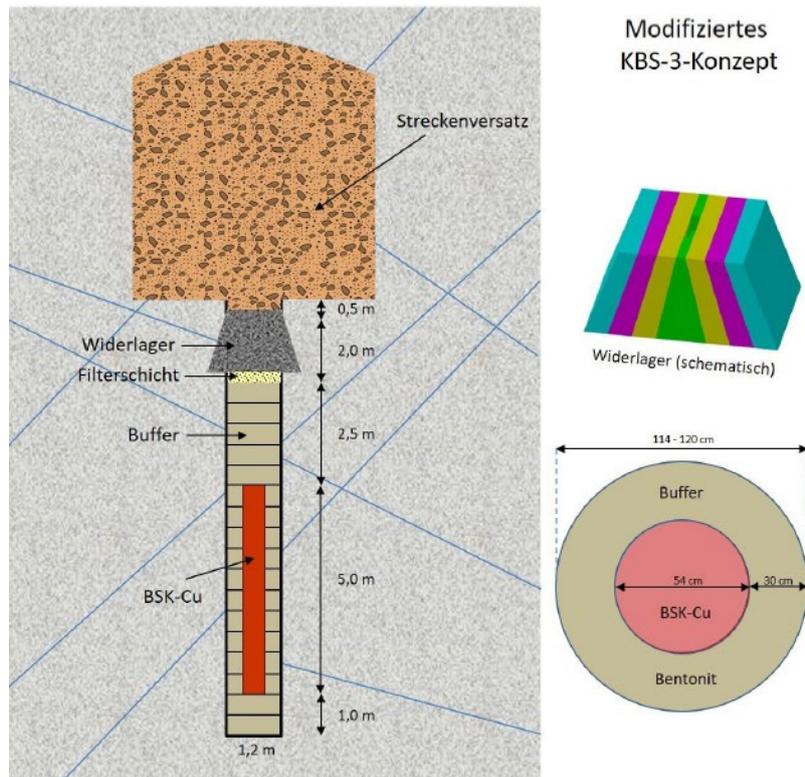


Abb. 2.2 Querschnittsprofil eines Einlagerungsbohrloch mit Ausbau und Gebinde mit bestrahlten Brennelementen für die Bohrlocheinlagerung wärmeentwickelnder Abfälle /JOB 21/

Nach Verschluss des Einlagerungsbohrlochs mit einem Widerlager erfolgt die Verfüllung des Hohlraums der Einlagerungsstrecke mit einem Gemisch aus Ausbruchsmaterial und Versatz. Querschläge und Abschnitte der Richtstrecken werden verfüllt, sobald sie für den Betrieb des Endlagers nicht mehr notwendig sind. Auch in den Richtstrecken wird ein Gemisch aus Ausbruchsmaterial und Versatz verwendet /JOB 21/. Bis zur Festlegung des genauen Materials werden durch /BGE 22/ Materialkennwerte von Bentonit angenommen.

2.2 FEP-Liste

Die Analyse einer FEP-Liste wird gemäß Begründungstext der EndISiAnfV zu § 3 /BUN 20/ als wichtiges Element eines systematischen Vorgehens nach dem internationalen Stand von Wissenschaft und Technik gesehen. Grundidee einer FEP-Analyse ist die Fragmentierung des ELS in seine Bausteine, den Komponenten und Eigenschaften (Features) sowie den einwirkenden Ereignissen (Events) und Prozessen (Processes). Die Fragmentierung des ELS erlaubt eine einfachere Analyse zur Entwicklung dieser

Prozesse im ELS. Aus der Analyse der einzelnen Bausteine des ELS können Rückschlüsse zum Gesamtsystem gezogen werden.

Als Standard wird international die abgestimmte FEP-Liste der OECD/NEA anerkannt /NEA 19/. Im Vergleich zu der FEP-Liste der OECD/ NEA bietet die in /FRE 20/ erstellte FEP-Matrix ein nachvollziehbareres System zur Identifikation der verschiedenen FEP sowie zu jedem individuellen FEP eine Auflistung assoziierter Prozesse³, die eine Bewertung der zugrunde liegenden Prozesse in einem ELS in größerer Detailtiefe erlaubt (Abb. 2.3). Die größere Detailtiefe ermöglicht auch eine bessere Bewertung von Kopplungen zwischen den Prozessen. Es muss hier angemerkt werden, dass im Rahmen dieses Vorhabens ausschließlich des Systems zur Identifikation der FEP nach /FRE 20/ verwendet worden ist. Das System ordnet alle FEP in der Matrix gemäß folgendem Schema:

KK.XX.PP.YY.a

KK: Bezeichnung der übergeordneten ELS-Komponente

XX: Identifikationsnummer der ELS-Komponente

PP: Bezeichnung der übergeordneten Eigenschafts-, Ereignis-, Prozessgruppe

YY: Identifikationsnummer der Eigenschaft-, Ereignis, Prozessgruppe

a: Assoziierter Prozess

Dieses Nummerierungssystem erlaubt die schnelle Zuordnung der Eigenschaften, Ereignisse und Prozesse anhand der FEP-Nummern. Die Abkürzungen können Abb. 2.3 entnommen werden. Beispielsweise steht „BB“ für Buffer and Backfill (Buffer und Ver-satz) und „TM“ für mechanische und thermomechanische Prozesse. Diese Abkürzungen werden in den Tabellen in Kapitel 3.1 verwendet. Es muss an dieser Stelle angemerkt werden, dass eine „00“ aufweisende Identifikationsnummer zwar mehrere ELS-Komponenten, allerdings nur selten alle dazugehörigen übergeordneten Eigenschafts-, Ereignis- und Prozessgruppen umfasst. Beispielsweise sind in der ELS-Komponente „Wirtsgestein“ (HR.00) biologische und thermo-biologische Prozesse (TB.) aufgelistet, welche allerdings nicht in weiteren wirtsgesteinsbezogenen Komponenten, wie der Auf-lockerungszone (HR.01) oder dem einschlusswirksamen Gebirgsbereich (HR.02)

³ : Prozesse und Ereignisse werden in diesem Bericht nicht unterschieden. Sie werden gemeinsam unter dem Begriff „Prozesse“ subsumiert. Eine Unterscheidung ist für die Ableitung einer günstigen Temperatur in einem ELS ohne Bedeutung.

berücksichtigt worden sind. Es wurde daher entschieden, diese FEP in die jeweiligen übergeordneten Prozessgruppen zu kopieren und sie an diesen Stellen zu analysieren.

Characteristics, Processes, and Events	Processes														Events				
	Characteristics	Mechanical and Thermal-Mechanical	Hydrologic and Thermal-Hydrologic	Chemical and Thermal-Chemical	Biological and Thermal-Biological	Transport and Thermal-Transport	Thermal	Radiological	Long-Term Geologic	Climatic	Human Activities (Long Timescale)	Other	Nuclear Criticality	Early Failure	Seismic	Igneous	Human Activities (Short Timescale)	Other	
Features / Components	CP	TM	TH	TC	TB	TT	TL	RA	LG	CL	HP	OP	NC	EF	SM	IG	HE	OE	
(GD) General Definitions																			
Waste and Engineered Barriers Region																			
(WF) Waste Form																			
(01) SNF and Cladding																			
(02) Vitrified HLW																			
(05) Other HLW																			
(06) Metal Parts from Reprocessing																			
(WP) Waste Package and Internals																			
(01) SNF																			
(02) Vitrified HLW																			
(05) Other HLW																			
(06) Metal Parts																			
(BB) Buffer/Backfill																			
(01) Waste Package Buffer																			
(02) Drift/Tunnel Backfill																			
(MW) Mine Workings																			
(01) Drift/Tunnel/Room Supports																			
(02) Liners																			
(03) Open Excavations/Areas																			
(04) Emplacement Boreholes																			
(SP) Seals/Plugs																			
(01) Drift/Tunnel Seals																			
(02) Shaft Seals																			
(03) Borehole Plugs																			
Geosphere and Natural Barriers Region																			
(HR) Host Rock																			
(01) Excavation Disturbed Zone (EDZ)																			
(02) Emplacement Unit(s)																			
(03) Other Host Rock Units																			
(OU) Other Geologic Units																			
(01) Overlying / Adjacent Units (including Caprock, Aquifers)																			
(02) Underlying Units																			
Surface Region																			
(BP) Biosphere																			
(01) Surface and Near-Surface Media and Materials																			
(02) Flora and Fauna																			
(03) Humans																			
(04) Food and Drinking Water																			
System Region																			
(RS) Repository System																			
(01) Assessment Basis																			
(02) Preclosure/Operational																			
(03) Other Global																			

Abb. 2.3 Allgemeine FEP-Matrix für ein Endlager für radioaktive Abfälle /FRE 20/

Insgesamt enthält die der FEP-Matrix zugrundeliegende FEP-Liste 500 individuelle FEP, welche mit über 600 individuellen assoziierten Prozessen kombiniert werden können. Die Kombination aus den FEP und den verschiedenen assoziierten Prozessen resultiert in einer Gesamtzahl von über 2.000 verschiedenen Datensätzen. Diese Datensätze sind in einer MS-Excel®-basierten Datenbank zusammengestellt und bilden die Grundlage der Relevanzprüfung und der Priorisierung. Es muss angemerkt werden, dass die Datensätze einer Konsistenzprüfung unterzogen worden sind, um die Vollständigkeit der Datensätze sicherzustellen. Die Prüfung bestand zunächst in einem Vergleich, ob die

assoziierten Prozesse in einem FEP in einer Komponente gleich oder ähnlich in einem gleichlautenden FEP in einer anderen Komponente aufgelistet sind. Fehlende assoziierte Prozesse sind in den entsprechenden Komponenten hinzugefügt worden. Zudem umfasst die Prüfung den Vergleich mit anderen FEP-Katalogen /BRA 19/, /JAH 13/, /JAH 16/, um gänzlich fehlende assoziierte Prozesse (z.B. Pyrolyse, Quarzzementation) zu identifizieren und hinzuzufügen.

2.3 Randbedingungen und Prämissen

Für die Durchführung der Untersuchungen ist es notwendig, einige Randbedingungen bzw. Prämissen festzulegen. Die Prämissen unterscheiden sich teilweise für die verschiedenen Wirtsgesteine, sie sind daher nicht in jedem Fall allgemeingültig. Im folgenden Kapitel werden für das Endlagersystem im Wirtsgestein Kristallingestein die wesentlichen Prämissen eingeordnet und erläutert.

Die Notwendigkeit, Prämissen aufzustellen, resultiert aus verschiedenen Ursachen:

- a. dem konzeptuellen Modellansatz für das Endlagersystem,
- b. Detaillierungsgrad der Einlagerungskonzepte,
- c. Kenntnis der Standortbedingungen und
- d. Bewertung von Prozessbeschreibungen.

Die Prämissen (b) und (c) sind zurückzuführen auf die noch geringe Detaillierung der vorläufigen Einlagerungskonzepte und den fehlenden Standortbezug. Die Prämissen wurden vor allem formuliert, um die Variabilität der Endlagersysteme einzugrenzen. Die Prämissen (d) folgen dem Ausschließen bzw. der geringen Einwirkung eines Prozesses oder Prozessablaufes.

Die Prämissen für den konzeptuellen Modellansatz betreffen die Komponenten Auflockerungszone (ALZ) und einschlusswirksamer Gebirgsbereich (ewG): Das Wirtsgestein Kristallingestein übernimmt im hier betrachteten Konzept – basierend auf technischen und geotechnischen Barrieren als die wesentlichen Barrieren – ausschließlich eine unterstützende Funktion für Bentonitversatz und Abfallbehälter. Es wird unterstellt, dass die hydraulische Durchlässigkeit der Kristallinformation im Nahfeld hinreichend gering ist, um eine gleichmäßige Aufsättigung des Versatzes zu gewährleisten und dessen Erosion zu unterbinden. Es wird zudem unterstellt, dass Mutationen von Mikroben nicht

grundsätzlich ausgeschlossen werden können, aber die Systemeinwirkungen eines kleinen Anteils mutierter Mikroben im Vergleich zu denen durch nicht mutierte Mikroben als vernachlässigbar eingeschätzt werden.

Prämissen für das Einlagerungskonzept (b) im Wirtsgestein Kristallingestein betreffen auch den Versatz aus Bentonit oder quellfähigem Ton:

- Für den Bohrlochversatz wird eine anhaltend formschlüssige Anbindung an die Kontur der Grubenräume unterstellt.
- Das Versatzmaterial für die Verfüllung der Einlagerungsbohrlöcher besteht aus einem Bentonit, der vernachlässigbaren geringen Gehalte an Organika, Sulfaten und Sulfiden (einschließlich Pyrit) sowie Karbonaten aufweist – z. B. Calcigel-Bentonite aus bayerischen Lagerstätten /UFE 08/, /KAU 08/ (vgl. Bilanzierung gemäß Kapitel 5.2.1 ff.).
- Für den Streckenversatz wird eine anhaltend formschlüssige Anbindung an die Kontur der Grubenräume und eine geringe Durchlässigkeit unterstellt, um hohe und insbesondere turbulente Lösungsbewegungen – ggf. hervorgerufen durch angefahrene Störungszonen – auszuschließen. Eine mögliche erosive Fluidbewegung aufgrund hydraulisch wirksamer Klüfte in den Strecken wird zudem durch Kluftverschlüsse unterbunden.

Die prozessspezifischen Prämissen (d) umfassen Prozessabläufe in den Komponenten Behälter und Versatz des Einlagerungsbohrlochs, die bei der Bewertung der Temperatur(un)verträglichkeit entweder uneingeschränkt berücksichtigt werden oder aber keine Berücksichtigung finden:

- Für die Komponente Behälter(oberfläche) wird die aerobe Metallkorrosion für integritätsrelevante Eigenschaften vernachlässigt, da die aeroben Redoxbedingungen nur einen kurzen Zeitraum (Wochen bis Monate, /SKB 19/) unmittelbar nach dem Verschließen eines Einlagerungsortes aufgrund des Sauerstoffverbrauchs anhalten; für RN-transportrelevante Eigenschaften werden die Einwirkungen in der benachbarten Komponente Versatz berücksichtigt.
- Es wird eine uneingeschränkte Verfügbarkeit von Wasser bzw. Lösung an der Behälteroberfläche unterstellt, siehe unten. Die Wässer bzw. Lösungen weisen relevante Salzgehalte auf, u. a. Sulfat und Chlorid.

- Für die Komponente Versatz wird unterstellt, dass aufgrund der hohen initialen Saugspannung im Bentonit die Lösung sehr schnell (innerhalb der Bergungsfrist) vordringen kann und Kapillareffekte danach vernachlässigbar sind. Damit wird für die Korrosion der Behälteroberfläche Lösung in ausreichendem Maße zur Verfügung stehen.
- Es wird unterstellt, dass der Versatz durch vordringende Lösung nicht erodiert wird.
- Es wird unterstellt, dass Konvektion den RN-Transport in der Komponente Versatz beeinflusst.

Die Prämissen finden sich bei den Begründungen der Relevanzprüfung und Priorisierung der Prozesse aus der FEP-Liste wieder.

3 Relevanzprüfung

Die Relevanzprüfung umfasst vier Teilprüfungen: die komponentenspezifische Prüfung, die prozessgruppenspezifische Prüfung, die einlagerungskonzeptspezifische Prüfung und die prozessspezifische Prüfung. Die Teilprüfungen sind hierarchisch angeordnet. Dies bedingt, dass sich die Anzahl der als relevant bewerteten FEP, einschließlich derer assoziierten Prozesse, nach jeder Teilprüfung reduziert. Das Ablaufschema in Abb. 3.1 zeigt nochmals den hierarchischen Charakter der Relevanzprüfung in Verbindung mit der Priorisierung (Kap. 4) und der Ableitung von TUF (Kap. 5). Es zeigt auch die Vorgehensweise der Bearbeitung der Datensätze in der MS-EXCEL®-basierten Datenbank auf. Das Ziel der Relevanzprüfung ist die Auswahl und Bewertung aller FEP, welche (1) in vom Wärmeeintrag beeinflussten Komponenten stattfinden (Komponentenspezifische Prüfung; Reiter "Features & Components"), (2) sich auf die Temperaturabhängigkeit der Prozessgruppe bzw. der assoziierten Prozesse bzw. auf die temperaturabhängigen Eigenschaften der Komponente beziehen (Prozessgruppenspezifische Prüfung: Reiter "Chara., Processes & Events" und "Prüfung Temperatur"), (3) potenziell in der ELS-Komponente stattfinden (Einlagerungskonzeptspezifische Prüfung: Reiter "Kristallin"), oder (4) einen potenziell bedeutsamen Einfluss auf die Komponente aufweisen (Prozessspezifische Prüfung; Reiter " Kristallin").

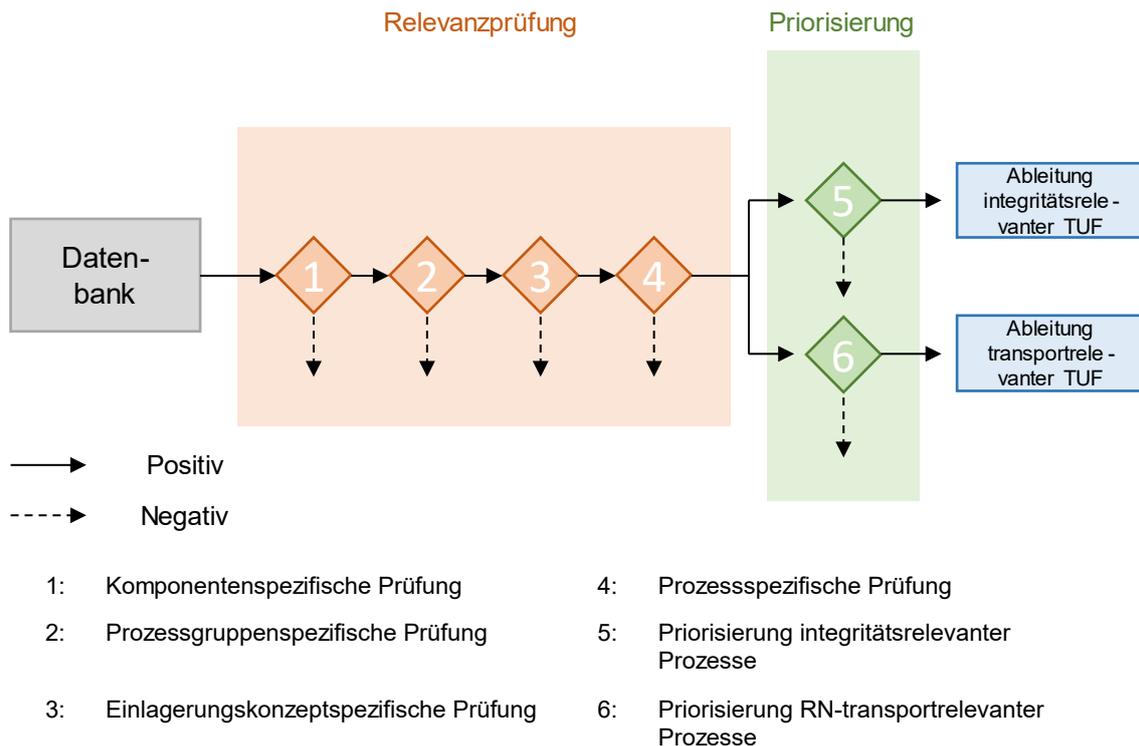


Abb. 3.1 Ablauf der Relevanzprüfung und Priorisierung

3.1 Komponentenspezifische Prüfung

Die komponentenspezifische Prüfung beabsichtigt festzustellen, ob eine ELS-Komponente von dem Wärmeeintrag, der während des radioaktiven Zerfalls von den Abfällen emittiert wird, betroffen ist.

Abb. 3.2 zeigt die in einem ELS zu berücksichtigenden Komponenten. Es muss hier angemerkt werden, dass die Komponenten in der Abbildung gemäß der internationalen FEP-Liste (IFEP) der OECD/NEA /NEA 00/ und nicht gemäß der im Kapitel 2.2 beschriebenen Liste nummeriert sind. Eine Temperaturerhöhung ausgelöst durch den radioaktiven Zerfall in den Abfällen betrifft naturgemäß nicht alle Komponenten gleichermaßen.

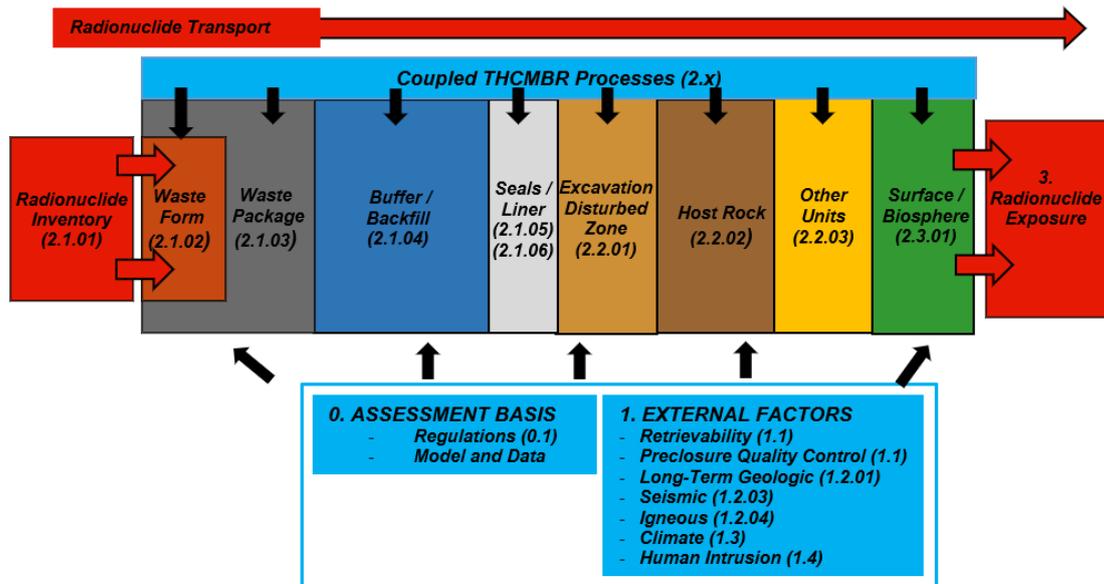


Abb. 3.2 Komponenten und einwirkende Prozesse in einem Endlagersystem /FRE 20/

Berechnungen zur Wärmeausbreitung im KBS-3-Modell sind in der folgenden Abbildung dargestellt.

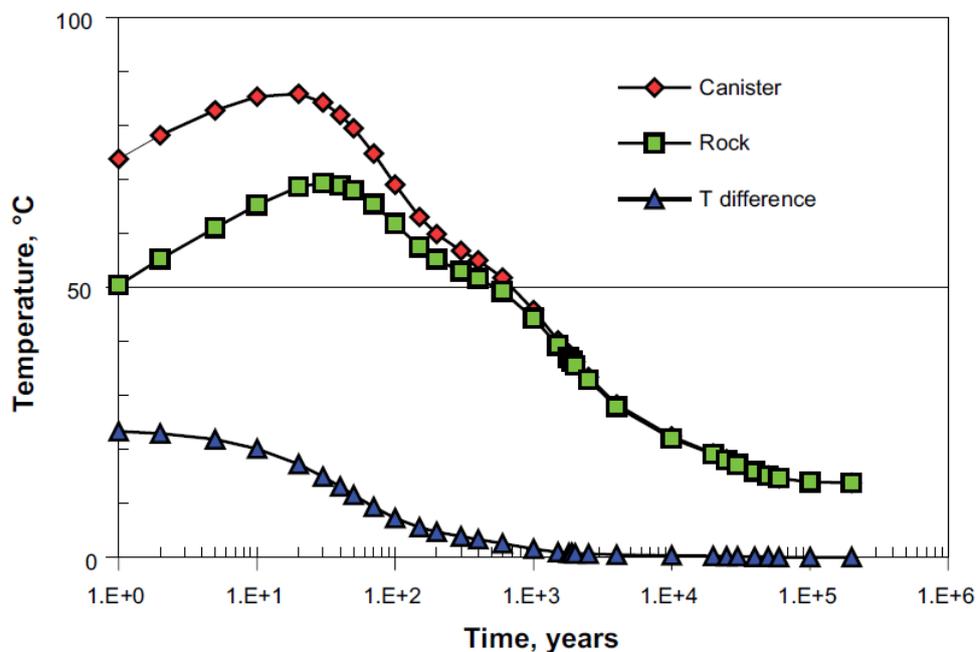


Abb. 3.3 Zeitliche Entwicklung der Temperatur an der Behälteroberfläche und an der Grenzfläche zwischen dem Versatz und dem Wirtsgestein in Kristallininformation (Auslegungstemperatur 100 °C) /KAR 06/

Für die Festlegung einer günstigen Temperatur werden die Komponenten in Tab. 3.1 als Komponenten mit einer signifikanten Temperaturerhöhung durch die Zerfallswärme der hochradioaktiven Abfälle angesehen. In Tab. 3.1 sind neben den Komponenten auch deren Bezeichnung bzw. Identifikationsnummer in der FEP-Matrix (Abb. 2.3) angegeben. Bei der Bewertung der Temperaturrelevanz werden in der FEP-Matrix prinzipiell nur Komponenten mit Barrierewirkung berücksichtigt.

Tab. 3.1 Temperaturbeeinflusste Komponenten und deren Bezeichnungen in /FRE 20/ für Kristallingestein

Komponente	Bezeichnung in FEP-Matrix	ID in FEP-Matrix
Behälter	Waste Package	WP.00
Versatz	Buffer/Backfill	BB.00 BB.01

Die Komponenten innerhalb des Behälters werden nicht betrachtet. Der innere Aufbau des Endlagerbehälters und voraussichtliche Konditionierungsmöglichkeiten der Abfälle lassen den Schluss zu, dass die Abfallmatrix innerhalb eines Behälters Temperaturen über 200 °C vertragen kann, auch wenn die Temperatur Einfluss auf die Korrosion der Glasmatrix in den Wiederaufarbeitungsabfällen hat /FRE 85/. Es wird in den weiteren Betrachtungen vorausgesetzt, dass die Behälter so ausgelegt werden können, dass die Abfallmatrix (WF.00 – WF.04) der Temperatur standhalten kann, die die günstige Temperatur für das Wirtsgestein bedingt.

Im hier betrachteten technischen Einlagerungskonzept sind nur die Komponenten Behälter und Versatz (im Einlagerungsbohrloch) für die Analyse der Temperaturverträglichkeit von Bedeutung, so dass alle weiteren Komponente für die Analyse entfallen.

3.2 Prozessgruppenspezifische Prüfung

Die prozessgruppenspezifische Prüfung beabsichtigt festzustellen, ob eine Prozessgruppe temperaturabhängig ist bzw. die Eigenschaften einer ELS-Komponente, einschließlich die ihrer Bestandteile, temperaturabhängig sind. Dieser Ansatz wurde ausgeweitet, um auf der Ebene der assoziierten Prozesse komponentenunspezifisch deren Temperaturabhängigkeit festzustellen.

Die folgenden Prozessgruppen sind per Definition temperaturabhängig bzw. können die thermischen Eigenschaften von Komponenten verändern und werden in der Analyse berücksichtigt:

- TL: Thermische Prozesse
- TM: Thermo-mechanische Prozesse
- TH: Thermo-hydraulische Prozesse
- TC: Thermo-chemische Prozesse
- TB: Thermo-biologische Prozesse
- TT: Transportprozesse
- RA: Radiologische Prozesse⁴

Folgende Prozessgruppen aus /FRE 20/ werden nicht ausgewertet:

- Langzeitliche **geologische Prozesse** (LG): Die relevante Wärmeentwicklung durch hochradioaktive Abfälle liegt in der Größenordnung von ca. 30.000 Jahren. Langzeitlich wirkende geologische Prozesse (z.B. Hebung/Senkung des Standorts) wirken sich in diesem geologisch gesehen kurzen Zeitraum nicht aus, so dass sie für die Ableitung einer günstigen geologischen Temperatur keine Rolle spielen sollten.
- **Klimatische Prozesse** (CL): Die relevante Wärmeentwicklung durch hochradioaktive Abfälle liegt in der Größenordnung von ca. 30.000 Jahren. Klimatische Prozesse (z.B. glaziale Erosion/Rinnenbildung) werden aber erst mit Einsetzen der nächsten Kaltzeit (frühestens in 50.000 Jahren erwartet /GAN 16/) wirksam werden, so dass sie für die Ableitung einer günstigen geologischen Temperatur keine Rolle spielen sollten.
- **Zukünftige menschliche Aktivitäten** (HP, HE): Zukünftige menschliche Aktivitäten, die im Zusammenhang mit dem ELS stehen, können aus heutiger Sicht nicht zuverlässig prognostiziert werden. Für die Ableitung einer optimalen Temperatur werden diese nicht berücksichtigt.
- **Sich selbst tragende Kettenreaktion** (NC): Den nationalen Regularien gemäß sind sich selbst tragende Kettenreaktionen auszuschließen (EndlSiAnfV § 8).

⁴ Radiologischen Prozesse sind keine thermischen Prozesse, können jedoch mit diesen Prozessen gekoppelt sein.

Somit kommt dieser Prozessgruppe für die Ableitung einer günstigen geologischen Temperatur keine Relevanz zu.

- **Seismische Ereignisse (SM):** Im deutschen Auswahlverfahren sind größere seismische Ereignisse auszuschließen. Ein Ausschluss aufgrund der heutigen Beobachtungslage ist zwar kein abschließender Beweis für das Auftreten stärkerer Ereignisse in den nächsten eine Million Jahren. Dennoch kann unterstellt werden, dass ein stärkeres seismisches Ereignis eine sehr niedrige Eintrittserwartung hat. Der Einfluss der Temperatur auf seismische Ereignisse ist zusätzlich als gering einzustufen.
- **Magmatische Ereignisse (IG):** Im deutschen Auswahlverfahren sind größere magmatische Ereignisse auszuschließen. Auf Grund der geologischen Randbedingungen ist dies in Deutschland für die in Frage kommenden Regionen auch in den nächsten eine Million Jahren als gegeben anzusehen.
- **Frühes Versagen (EF):** Ein mögliches frühes Versagen von Barrieren resultiert vor allem durch menschliche Fehler / begrenzte Detektion bei der Fertigung technischer oder geotechnischer Barrieren. Der Einfluss der Temperatur auf solche Ereignisse ist grundsätzlich als gering einzustufen.

Wie oben angesprochen wurde auch die Temperaturabhängigkeit der 600 individuellen assoziierten Prozesse komponentenunspezifisch im Rahmen der Prüfung festgestellt. Es sind folgende Bewertungskategorien definiert worden: „Temperaturabhängig (Ja)“, „Temperaturunabhängig (Nein)“, „Berücksichtigt“, „Nicht berücksichtigt“. Die verwendeten Bewertungskategorien begründen sich auf die Sachverhalte, dass der assoziierte Prozess

- eine Randbedingung der Untersuchung darstellt (z. B. Abfallinventar; Kategorie „Berücksichtigt“)
- externen Faktoren unterliegt (z. B. Klima, menschliches Eindringen, Kategorie „Nicht berücksichtigt“)

Im weiteren Verlauf der Relevanzprüfung sind nur die diejenigen assoziierten Prozesse berücksichtigt, deren Temperaturabhängigkeit festgestellt worden ist.

3.3 Einlagerungskonzeptspezifische Prüfung

Die einlagerungsspezifische Prüfung beabsichtigt festzustellen, ob ein assoziierter Prozess unter Berücksichtigung des zugrunde gelegten Einlagerungskonzeptes überhaupt in der ausgewählten Komponente eintreten bzw. auf die ausgewählte Komponente einwirken kann.

Die verwendete FEP-Liste wurde zur Analyse und Bewertung eines Endlagers im Salz entwickelt /FRE 20/. Auch enthält die FEP-Liste in /FRE 20/ Prozesse, die einen Bezug zu anderen Endlagerkonzepten haben oder im zugrunde gelegten Einlagerungskonzept aufgrund verschiedener Aspekte (z.B. anderes Abfallinventar, andere Verschluss- bzw. Versatzmaterialien) nicht auftreten können. Darüber hinaus werden Prozesse in dieser Prüfung als irrelevant eingestuft, wenn diese im Rahmen der Komponentenauslegung ausgeschlossen worden sind. Pfützenbildung und turbulente Strömungen sind Beispiele für Prozesse mit Bezug zu anderen Endlagerkonzepten; das Abbinden von Beton im Versatz sind Beispiele für Prozesse, welche aufgrund des zugrunde gelegten Einlagerungskonzeptes nicht auftreten können; Plastische Verformungen und Versagen des Behälters ist ein Beispiel für Prozesse, die mittels der Auslegung vermieden werden.

3.4 Prozessspezifische Prüfung

Die prozessspezifische Prüfung beabsichtigt festzustellen, ob der assoziierte Prozess unter Berücksichtigung des zugrunde gelegten Einlagerungskonzeptes einen Einfluss auf das Verhalten der jeweiligen Komponente haben kann, und zu bewerten, ob dieser potenzielle Einfluss von Bedeutung für die Ableitung einer günstigen Temperatur ist. Prozesse, die innerhalb der Zeitdauer des Temperaturimpulses vollständig reversibel sind, z. B. elastische Prozesse, werden als nicht relevant angesehen.

Im Gegensatz zu der prozessgruppenspezifischen Prüfung berücksichtigt die prozessspezifische Prüfung das zugrunde gelegte Einlagerungskonzept, insbesondere die Komponenten, und stellt allgemein heraus, was der assoziierte Prozess unter ansteigenden Temperaturen in der Komponente induzieren kann. Beispiele für wenig bedeutenden assoziierten Prozesse sind alle diejenigen, die das Vorhandensein oder den (advektiven bzw. diffusiven) Transport von Gas im einschlusswirksamen Gebirgsbereich beinhalten. Diese Einschätzung basiert auf der Prämisse, dass keine Gasphase im einschlusswirksamen Gebirgsbereich vorhanden ist.

4 Priorisierung

Für diejenigen Prozesse, die in der Relevanzprüfung als temperaturabhängig und bedeutsam für die Festlegung einer günstigen Temperatur einer Komponente eingestuft wurden, findet ein weiterer Eingrenzungsprozess statt. Dazu findet eine Bewertung statt, ob der Prozess hinsichtlich der integritätsrelevanten Eigenschaften der Komponente und / oder hinsichtlich der RN-transportrelevanten Eigenschaften innerhalb der Komponente relevante Auswirkungen aufweist. Nur wenn mindestens eine dieser beiden Bedingungen erfüllt ist, wird der Prozess „priorisiert“ und in der weiteren Bewertung berücksichtigt.

Die Bewertung erfolgt zunächst noch rein qualitativ. Beispielsweise kann der Einfluss der Temperaturabhängigkeit eines Prozesses auf einen der beiden Aspekte integritätsrelevante oder RN-transportrelevante Eigenschaften als vernachlässigbar eingestuft werden oder es wird angegeben, ob der Prozess eher bei höheren oder niedrigeren Temperaturen günstig hinsichtlich integritätsrelevanter oder RN-transportrelevanter Eigenschaften einwirkt.

Eine Bewertung in diesem Stil baut auf den Ergebnissen aus /BRA 19/ auf. Dort sind auch ausführliche Beschreibungen zu den in Kap. 5 aufgeführten Prozessen zu finden.

5 Ableitung von TUF

Allen assoziierten Prozessen, die im Rahmen der Priorisierung als temperaturabhängig und bedeutsam für die Festlegung einer günstigen Temperatur einer Komponente eingestuft wurden, werden primäre TUF zugewiesen. Diese TUF werden in Kap. 5.1 dargestellt. Eine ausführliche Erläuterung zu den dahinterstehenden Prozessen ist /BRA 19/ zu entnehmen. Im Anschluss wird für die Bilanzierungsgrößen Porosität, Lösungsmenge, Gasmenge und H₂S-Menge die Beiträge verschiedener primärer TUF bestimmt (Kap. 5.2). Darauffolgend werden abgeleitete TUF generiert (Kap. 5.3). Diese leiten sich aus den primären TUF und den Bilanzierungsgrößen ab, beispielsweise durch Multiplikation. Hier findet auch eine Skalierung des Wertebereichs [0,1] statt. Ausschließlich die in Kap. 5.3 abgeleiteten TUF finden dann Verwendung für die Bestimmung der GTUF der verschiedenen Komponenten.

5.1 Primäre TUF

Sobald bei der Priorisierung ein in der betreffenden Komponente stattfindender Prozess oder eine Komponenteneigenschaft identifiziert wird, welche die Temperaturunverträglichkeit dieser oder benachbarter Komponenten bzw. den RN-Transport beeinflussen können, erfolgt die Zuordnung dieses Einflusses einer TUF hinsichtlich der integritäts- bzw. RN-transportrelevanten Eigenschaften der Komponente. Unter den primären TUF wird die Menge der temperaturabhängigen Einflussgrößen verstanden, mit der alle temperaturbedingten Änderungen in einer Komponente innerhalb des Temperaturimpulses in der Nachverschlussphase umfassend, wenn auch vereinfacht, abgebildet werden können. Es wird z. B. davon ausgegangen, dass mit Hilfe der primären TUF „Konsolidierung“, „Lösungsdruck“ und „Gasdruck“ die Reaktion der Spannungsverhältnisse auf die Temperaturentwicklungen im Nahfeld eines Endlagers abgebildet werden kann. Auf ähnliche Weise wird hier davon ausgegangen, dass die primären TUF „Viskosität“, „Dichte“, „Rückhaltung“, „Diffusionskoeffizient“ und „RN-Konzentration“, welche als unabhängige Parameter bzw. Größen in die Transportgleichung mit einem Reaktionsterm einfließen, die Temperaturabhängigkeit des RN-Transports abbilden können. In diese Transportgleichung fließt außerdem die temperaturabhängige Größe Porosität über den effektiven Diffusionskoeffizienten ein. Die Porosität wird hier allerdings als nicht unabhängig betrachtet, weil ihre temperaturbedingten Änderungen durch andere primäre TUF, wie „Quellen“, „Smektit-Illitisierung“, „Karbonatzersetzung“ u. a., abgebildet werden. Obwohl der Diffusionskoeffizient für Lösungen aus Viskosität und Temperatur nach der Stokes-

Einstein-Gleichung hergeleitet wird, wird er trotzdem in der Liste der primären TUF aufgeführt, weil der hydrodynamische Radius der diffundierenden Teilchen in dieser Gleichung aufgrund verschiedener temperaturabhängiger Prozesse modifiziert werden und dadurch die Temperaturabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten von der Viskosität abweichen kann.

Wenn relevante Einzelprozesse als Teil eines übergeordneten Gesamtprozesses identifiziert werden, können sie einer TUF zugeordnet werden. Dies gilt z. B. für die Zusammenlegung von Korrosionsprozessen. Die Zusammenlegung kann ohne Weiteres zu einem späteren Zeitpunkt rückgängig gemacht werden.

Einem Prozess können mehr als eine primäre TUF zugeordnet werden. Beispielsweise können dem Prozess „Flächenhafte Korrosion“ hinsichtlich der integritätsrelevanten Eigenschaften der Komponente WP.00 (Behälter) die primären TUF „Korrosionsrate“ und „Korrosionsrate durch H₂S“, zugeordnet werden, weil die Temperaturabhängigkeit der Rate bzw. der Ausprägung dieses Prozesses durch bekannte Korrosionsraten aufgrund der Wechselwirkungen mit H₂S und/oder Wasser abgebildet werden kann. Die mit der Korrosion einhergehende Bildung von H₂ und der Wasserverbrauch werden nicht als primäre TUF betrachtet, weil ihre Raten mit den entsprechenden Korrosionsraten gleichgesetzt werden und somit von letzteren nicht unabhängig sind.

Ein und dieselbe primäre TUF kann auch mehreren Prozessen zugeordnet werden, die sie in ihrer Gesamtwirkung – begründet durch theoretische Überlegungen und empirische Rückschlüsse – abbildet. Als ein Beispiel bildet die primäre TUF „Smektit-Illitisierung“ die Prozesse „Alteration von Mineralen“, „Smektit-Illitisierung und andere Mineralumwandlungen“ sowie „Spannungsänderung durch Mineralumwandlung“ ab. Kann der temperaturabhängige Beitrag eines Prozesses zur bereits für einen anderen Prozess zugeordneten TUF mit dem aktuellen Kenntnisstand oder bei den vorausgesetzten Randbedingungen jedoch noch nicht quantifiziert werden, wird diesem Prozess ein potenzieller Beitrag als Vorlage bzw. Merkposten für eine evtl. Berücksichtigung zu einem späteren Zeitpunkt bescheinigt. Beispielsweise kann der Beitrag des Prozesses „Physisorption (immobile Phasen)“ zur TUF „Rückhaltung“ aufgrund seines elementspezifischen Charakters aktuell nicht quantifiziert werden, was aber zu einem späteren Zeitpunkt nachgeholt werden kann, sobald die für einen Standort relevante Auswahl an Radionukliden festgelegt wird.

Primäre TUF werden entweder aus fundamentalen Gesetzmäßigkeiten, wie z. B. dem „Diffusionskoeffizient“ in Gasen aus der Chapman-Enskog-Theorie, oder aus phänomenologischen Beobachtungen, wie z. B. „Karbonatzersetzung“, „Smektit-Illitisierung“ oder „Thermochemische Sulfatreduktion“, hergeleitet. Dabei kann die funktionelle Temperaturabhängigkeit der primären TUF allgemein gültig (z. B. „Diffusionskoeffizient“) oder standort- bzw. einlagerungskonzeptabhängig sein. Zum Beispiel hängt die Form der standortabhängigen primären TUF „Karbonatzersetzung“ und „Smektit-Illitisierung“ von der mineralischen Zusammensetzung des Versatzmaterials ab. Die Form der einlagerungskonzeptabhängigen primären TUF „Korrosionsrate“ hängt wiederum von der Beschaffenheit des Behälters ab.

Während die durch eine fundamentale Gesetzmäßigkeit vorgegebene Temperaturabhängigkeit bei der Herleitung einer primären TUF mit dieser Skalierung direkt umgesetzt werden kann, bedarf die Herleitung aus phänomenologischen Beobachtungen einiger Annahmen, die im unterschiedlichen Maß von Expertenmeinungen festgelegt werden. Zum Beispiel erfolgte die Herleitung der standortabhängigen primären TUF „Konsolidierung“ anhand der in /JOB 07/ beschriebenen Ergebnisse eines In-Situ-Experiments im Felslabor Mont Terri (CH). Im Rahmen des HE-D-Experiments wurde ein Bohrloch in die tonige Fazies des Opalinuston abgeteuft und mit fiberoptischen Sensoren zur Längen- und Temperaturänderungsmessung ausgestattet. Das Erhitzen des Systems führte zunächst zur Längenexpansion und ab einer Temperatur von 90 °C zu einer Kontraktion. Das expansive-kontraktive Verhalten der tonigen Fazies unter Temperaturerhöhung wurde auch von /MON 11/ mittels drainierter triaxialer Kompressionsexperimente gezeigt. Allerdings erreichte die dort ermittelte Expansions-Kontraktionslinie das Maximum bereits bei einer Temperatur von 68 °C. Da dieses expansive-kontraktive Verhalten von vielen standortabhängigen Faktoren (Tonmineralgehalt, Schichtung, Drainagebedingungen) beeinflusst wird, orientierte sich die Expertenmeinung an den In-Situ-Messungen.

Im Gegensatz zu den in Kap. 5.3 beschriebenen, abgeleiteten TUF, welche durch Verschiebung und Skalierung den Wertebereich [0,1] erhalten, sind die primären TUF teilweise noch dimensionsbehaftet. Dies ist dadurch begründet, dass einige primäre TUF durch Einsetzen in physikalische Gesetze oder durch Multiplikation mit Bilanzierungsgrößen miteinander verknüpft werden, um mathematische Beschreibungen von abgeleiteten TUF zu erzeugen. Insbesondere eine (additive) Verschiebung primärer TUF würde bei anschließender Multiplikation zu verzerrten Ergebnissen führen (während einer Skalierung in diesem Fall kein Problem darstellt).

Die folgende Tabelle listet die für das Wirtsgestein Kristallingestein identifizierten primären TUF zusammen mit den durch sie abgebildeten Prozessen auf.

Tab. 5.1 Primäre TUF für das Wirtsgestein Kristallgestein

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
<i>integritätsrelevante TUF</i>		
Quellen	BB.01	BB.01.TM.04 A Spannungsänderung durch Quellen von Tonmineralen
Smektit-Illitisierung	BB.01	BB.01.TC.02 A Alteration von Mineralen BB.01.TM.04 B Smektit-Illitisierung und andere Mineralumwandlungen
Wasserdampfeinwirkung	BB.01	BB.01.TC.02 I Wasserdampfeinwirkung auf Bentonit
Quarzzementation	BB.01	BB.01.TC.02 J/G Quarzzementation
Mikrobielle Eisenreduktion	BB.01	BB.01.TB.01 L Sulfatreduktion BB.01.TB.01 M Eisenreduktion
Karbonatzersetzung	BB.01	BB.01.TC.02 K Zersetzung von Karbonatmineralen
Mineralumwandlung	BB.01	BB.01.TC.01 H Lösungsinteraktion mit Behälter und Ausbau BB.01.TC.01 M Thermochemische Sulfatreduktion BB.01.TC.02 B Redoxprozesse BB.01.TC.02 C Mineralauflösung und -auslaugung BB.01.TC.02 D Thermo-chemische Expansion und Rissbildung BB.01.TC.02 F Alteration von Mineralen aufgrund des durch die Radiolyse veränderten Lösungsschemismus

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01.TC.02 L Alteration und Neubildung von Mineralen
Lösungsdruck	BB.01	BB.01.TH.01 A Druckgetriebene Strömung (Lösung) BB.01.TH.01 B Druckgetriebene Strömung (Gas) BB.01.TH.01 D Druckgetriebene Strömung zwischen Kluft und Matrix BB.01.TM.04 C Spannungsänderung durch Lösungsdruck
Gasdruck	BB.01	BB.01.TH.01 A Druckgetriebene Strömung (Lösung) BB.01.TH.01 B Druckgetriebene Strömung (Gas) BB.01.TH.01 D Druckgetriebene Strömung zwischen Kluft und Matrix BB.01.00.TM.04 D Spannungsänderung durch Gasdruck
Thermochemische Sulfatreduktion	BB.01	BB.01.TC.01 M Thermochemische Sulfatreduktion
Mikrobielle Sulfatreduktion	BB.01/WP.00	BB.01.TB.01 H Mikrobielle Gasbildung BB.01.TB.01 L Sulfatreduktion WP.00.TB.03 A Mikrobiell beeinflusste Korrosion
Methanogenese	BB.01	BB.01.TB.01 H Mikrobielle Gasbildung BB.01.TB.01 K Methanogenese WP.00.TB.03 A Mikrobiell beeinflusste Korrosion
Fermentation	BB.01	BB.01.TB.01 H Mikrobielle Gasbildung BB.01.TB.01 O Fermentation

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		WP.00.TB.03 A Mikrobiell beeinflusste Korrosion
Mechanisch induzierte H ₂ -Bildung	BB.01	BB.01.TC.02 G Bildung von H ₂ in gebrochenen Silikatkörnern
Pyrolyse	BB.01	BB.01.02.TC.03 C Pyrolyse des Kerogens
Thermolabile Organika	BB.01	BB.01.TC.03 C Pyrolyse des Kerogens
CO ₂ -Desorption	BB.01	BB.01.TC.03 D Pyrolyse des Kerogens
H ₂ -induzierte Pyrit-Reduktion	BB.01	BB.01.TC.02 M H ₂ -induzierte Pyrit-Reduktion
Korrosionsrate durch H ₂ S	WP.00/ BB.01	BB.01.TC.01 H Lösungsinteraktion mit Behälter und ggf. verbleibenden Metallteilen BB.01.TC.01 I Lösungsinteraktion mit Korrosionsprodukten des Behälters WP.00.TC.02 A Gasbildung aus der anaeroben Metallkorrosion WP.00.TC.03 C Flächenhafte Korrosion WP.00.TC.03 D Bildung und Stabilität der Passivierungsschicht WP.00.TC.04 A/B, WP.00.TC.05 A/B, WP.00.TC.08 A Lokale Korrosionsprozesse*
Versprödungsrate	WP.00	WP.00.RA.02 A Versprödung des Behälters durch Strahlung WP.00.TC.06 A/B/C Wasserstoff-Versprödung WP.00.TM.02 C Versprödung des Behälters durch lokale Korrosion
<i>RN-transportrelevante TUF</i>		
Viskosität	BB.01	BB.01.TC.01 H Lösungsinteraktion mit Behälter und Ausbau

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01.TC.01 I Lösungsinteraktion mit Korrosionsprodukten des Behälters und Ausbaus BB.01.TH.03 A Freie Konvektion BB.01.TH.07 C Dichte- und Viskositätsänderungen der Fluide BB.01.TT.01 A Advektion (Lösung) BB.01.TT.01 B Dispersion (Lösung) BB.01.TT.01 C Diffusion (Lösung) BB.01.TT.01 D Matrixdiffusion BB.01.TT.04 C RN-Transport durch Konvektion BB.01.TT.05 A Advektion (Gas) BB.01.TT.05 B Diffusion (Gas) BB.01.TT.07 D Matrixdiffusion (Kolloide)
Dichte	BB.01	BB.01.TC.01 C Auflösung BB.01..TC.01 D Ausfällung BB.01.TC.01 H Lösungsinteraktion mit Behälter und Ausbau BB.01..TC.01 I Lösungsinteraktion mit Korrosionsprodukten des Behälters und Ausbaus BB.01.TC.01 J Lösungsinteraktion mit eindringenden Lösungen aus anderen Komponenten BB.01.TC.01 L Osmotische Bindungen BB.01.TH.03 A Freie Konvektion BB.01.TH.07 C Dichte- und Viskositätsänderungen der Fluide BB.01.TT.01 A Advektion (Lösung)

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01.TT.01 B Dispersion (Lösung) BB.01.TT.01 C Diffusion (Lösung) BB.01.TT.01 D Matrixdiffusion BB.01.TT.04 C RN-Transport durch Konvektion BB.01.TT.05 A Advektion (Gas) BB.01.TT.05 B Diffusion (Gas) BB.01.TT.07 D Matrixdiffusion (Kolloide)
Rückhaltung	BB.01	BB.01.TB.01 D Biofilmbildung BB.01.TB.01 F Aufbau von Biomasse BB.01.TB.01 G Mikrobielle Bioakkumulation BB.01.TB.01 L Sulfatreduktion BB.01.TB.01 M Eisenreduktion BB.01.TC.01 B Redoxprozesse BB.01.TC.01 E Kolloidbildung und -filtration BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 A Alteration von Mineralen BB.01.TC.02 B Redoxprozesse BB.01.TC.02 C Mineralauflösung und -auslaugung BB.01.TC.02 F Alteration von Mineralen aufgrund des durch die Radiolyse veränderten Lösungsschemismus BB.01.TC.02 L Alteration und Neubildung von Mineralen

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01.TT.02 A Physisorption (immobiler Phasen) BB.01.TT.02 B Oberflächenkomplexierung BB.01.TT.02 C Ionenaustausch (mit stationären Phasen) BB.01.TT.03 A Physisorption (mobile Phasen) BB.01.TT.03 C Ionenaustausch (mit mobilen Phasen) BB.01.TT.03 E Chemosorption BB.01.TT.06 A Bildung von Eigenkolloiden BB.01.TT.06 B Bildung von Fremdkolloiden BB.01.TT.06 C Sorption an Kolloiden BB.01.TT.07 E Kolloidstabilität BB.01.TT.07 F Filtration (Kolloide) BB.01.TT.08 A Kolloidfiltration BB.01.08 B Gas-/ Lösungsgrenzflächensorption
Diffusionskoeffizient	BB.01	BB.00.RA.01 C Veränderung der Lösungsschemie durch Radiolyse BB.01.TB.01 B Mikrobielle Komplexbildung BB.01.TB.01 C Mikrobielle Kolloidbildung BB.01.TB.01 E Biodegradation BB.01.TC.01 A Speziation BB.01.TC.01 B Redoxprozesse BB.01.TC.02 L Alteration und Neubildung von Mineralen

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01.TH.05 A Diffusion der Dampfphase BB.01.TH.05 B Diffusion des gelösten Gases BB.01.TH.06 C Schwellenwertfluss BB.01.TT.01 E Komplexbildung BB.01.TT.01 F Isotopische Verdünnung BB.01.TT.03 B Wechselwirkungen mit organischen Komplexbildnern
RN-Konzentration	BB.01	BB.00. RA.01 C Veränderung des Lösungsschemismus durch Radiolyse BB.01.TC.01 B Redoxprozesse BB.01.TC.01 E Kolloidbildung und -filtration BB.01.TC.01 F Änderung der chemischen Zusammensetzung durch Sorption BB.01.TC.01 G Löslichkeit (RN und andere Spezies) BB.01.TC.01 L Osmotische Bindungen BB.01.TC.02 K Zersetzung von Karbonatmineralen BB.01.TH.03 B Infiltration, Abfluss BB.00.TH.04 A Dünnschichtfluss BB.01.TH.04 C Immobilisierung der Porenwässer BB.01.TT.01 A Advektion (Lösung) BB.01.TT.01 B Dispersion (Lösung) BB.01.TT.01 C Diffusion (Lösung) BB.01.TT.01 D Matrixdiffusion

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01.TT.01 H Löslichkeit (von RN und anderen Spezies) BB.01.TT.02 D Ausfällung/ Auflösung (mit immobilen Phasen) BB.01.TT.03 D Ausfällung/ Auflösung BB.01.TT.04 C RN-Transport durch Konvektion BB.01.TT.05 A Advektion (Gas) BB.01.TT.05 B Diffusion (Gas) BB.01.TT.06 A Bildung von Eigenkolloiden BB.01.TT.07 A Advektion (Kolloide) BB.01.TT.07 B Dispersion (Kolloide) BB.01.TT.07 C Diffusion (Kolloide) BB.01.TT.07 D Matrixdiffusion (Kolloide)
Thermische Osmose	BB.01	BB.01.TT.04 B RN-Transport durch thermische Osmose

* zusammenfassende Bezeichnung für verschiedene Einzelprozesse zur lokalen Korrosion

Die Herleitung der mathematischen Beschreibung der primären TUF wird im Folgenden aufgezeigt.

5.1.1 Quellen

Die TUF „Quellen“ berücksichtigt die temperaturabhängige Porositätsänderung durch das Quellen von Tonmineralen in Kontakt mit Lösung. Dazu werden die Versuchsergebnisse aus /MEL 23/ verwendet. In den entsprechenden Versuchen wurden u. a. für den Bentonit B25 (Calcigel) und Opalinuston Permeabilitätsmessungen bei Temperaturen bis 150 °C durchgeführt. Die aus mehrfachen Messungen bei den Versuchstemperaturen 35 °C, 60 °C, 100 °C, 120 °C und 150 °C ermittelten Permeabilitäten wurden mit Hilfe der Kozeny-Carman-Beziehung /KOZ 27/

$$\frac{k}{k_0} = \frac{\phi^3}{(1-\phi)^2} \frac{(1-\phi_0)^2}{\phi_0^3} \quad (5.1)$$

k [m²]: Temperaturabhängige Permeabilität

k_0 [m²]: Permeabilität bei 35 °C

ϕ [-]: Temperaturabhängige Porosität

ϕ_0 [-]: Porosität bei 35 °C

in Porositäten umgerechnet. Die zugehörige polynomielle Fit-Funktion

$$\phi_{B25}(\vartheta) = 1,08637 \cdot 10^{-5} \left(\frac{\vartheta}{\text{°C}}\right)^2 - 0,001181716 \left(\frac{\vartheta}{\text{°C}}\right) + 0,428450317 \quad (5.2)$$

ϑ [°C]: Temperatur

ϕ_{B25} [-]: temperaturabhängige Porosität für B25

ergibt die TUF „Quellen“ für die Komponente Versatz in einem Temperaturbereich bis 150 °C. Mangels experimenteller Daten für höhere Temperaturen wird angenommen, dass die Porosität und damit die TUF „Quellen“ für Temperaturen ab 150 °C konstant ist.

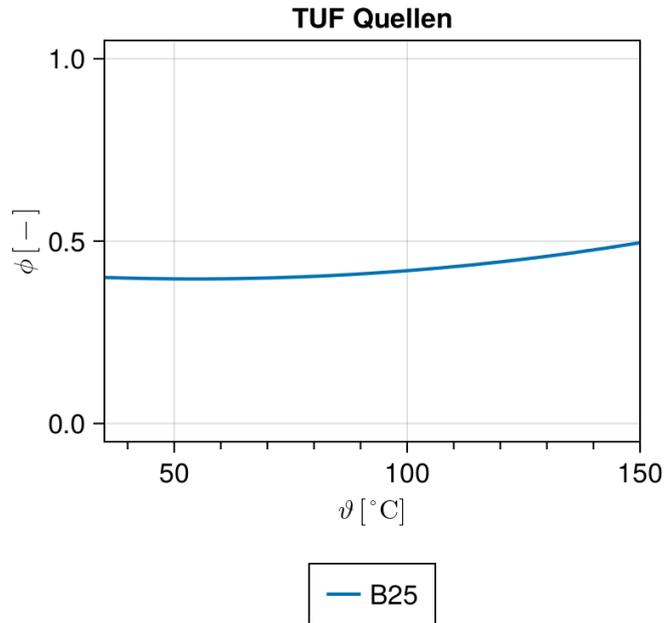


Abb. 5.1 Temperaturabhängiger Porositätsverlauf errechnet aus den in /MEL 23/ experimentell bestimmten Permeabilitäten für B25

5.1.2 Smektit-Illitisierung

Smektite und Illite sind zwei Tonmineralgruppen mit unterschiedlichen Eigenschaften. Smektite zeichnen sich gegenüber Illiten durch eine höhere Kationenaustauschkapazität und Quellfähigkeit aus. Mit steigender Temperatur werden Smektite zunehmend in Illite umgewandelt, sodass die günstigen Eigenschaften von Ton und Bentonit mit erhöhter Temperatur verloren gehen können. Die TUF „Smektit-Illitisierung“ basiert auf dem in /ŠUC 93/ gemessenen, temperaturabhängigen Smektit-Anteil in Smektit-Illit-Wechsellaagerungen einer Bentonit- und einer Tonsteinformation. Die in Abb. 5.2 dargestellten Messdaten werden dazu durch die Fit-Funktion

$$k_{\text{SI,Bentonit}}(\vartheta) \propto \arctan\left(\frac{\vartheta - 110 \text{ °C}}{30 \text{ °C}}\right) \quad (5.3)$$

ϑ [°C]: Temperatur

$k_{\text{SI,Bentonit}}$ [-]: TUF der Smektit-Illitisierung für Bentonit

repräsentiert.

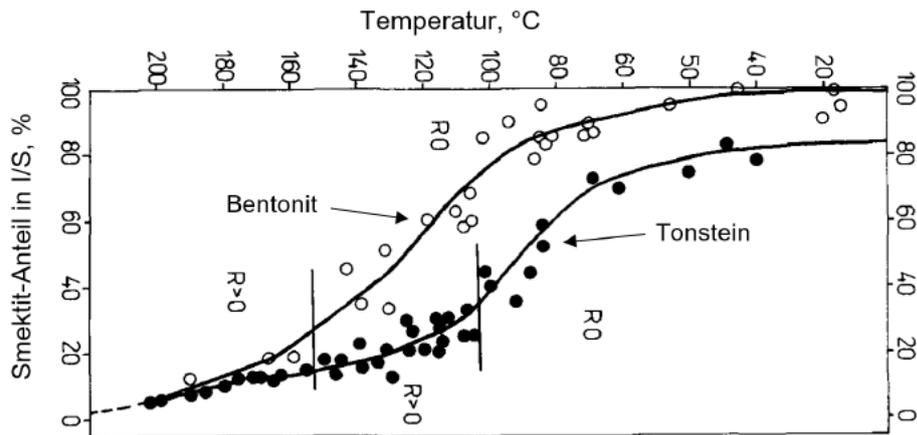


Abb. 5.2 Smektit-Anteil der Smektit-Illit-Wechselagerung einer Bentonit-Formation bzw. eines Tongesteins in Abhängigkeit von der Temperatur /ŠUC 93/

5.1.3 Wasserdampfeinwirkung

Die TUF „Wasserdampfeinwirkung“ berücksichtigt die starke Reduzierung der osmotischen Quellfähigkeit von Bentoniten durch die Wechselwirkung mit Wasserdampf bei erhöhten Temperaturen /COU 85/, /OSC 89/, /CUE 01/, /HEU 14/. Dieser Effekt wird durch einen partiellen oder vollständigen Verlust des Hydratationswassers der austauschbaren Kationen an Tonmineraloberflächen oberhalb von 150 °C erklärt /OUH 10/. Daher wird die Temperaturabhängigkeit durch eine Sprungfunktion bei 150 °C

$$k_{WD}(\vartheta) = \begin{cases} 0, & 35 \text{ °C} \leq \vartheta < 150 \text{ °C} \\ 1, & 150 \text{ °C} \leq \vartheta < 250 \text{ °C} \end{cases} \quad (5.4)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{WD} [-]: TUF der Wasserdampfeinwirkung auf Bentonit

abgebildet.

5.1.4 Quarzzementation

Im Temperaturbereich 60 – 80 °C fällt das bei der Illitisierung freigesetzte Siliziumoxid zu mikrokristallinem Quarz aus. Ab Temperaturen von ca. 85 °C wird die Bildung von Quarzplättchen begünstigt /THY 11/. Bis ca. 130 °C überwiegen noch die Tonmineral-Tonmineral-Kornkontakte im Tongestein /GOU 16/. Bei Temperaturen über 150 °C kann nahezu kontinuierlicher Quarzzement beobachtet werden /THY 11/. Entsprechend sind

Temperaturen bis 85 °C günstig. Danach steigt die TUF von 85 – 130 °C schwach und folgend bis 150 °C stark an. Dieser Trend wird durch die Funktion

$$k_{\text{QZ}}(\vartheta) = \begin{cases} 0, & 35 \text{ °C} \leq \vartheta < 85 \text{ °C} \\ \left(\frac{\vartheta - 85 \text{ °C}}{150 \text{ °C} - 85 \text{ °C}} \right)^4, & 85 \text{ °C} \leq \vartheta < 150 \text{ °C} \\ 1, & 150 \text{ °C} \leq \vartheta \leq 250 \text{ °C} \end{cases} \quad (5.5)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{QZ} [-]: TUF der Quarzzementation

dargestellt.

5.1.5 Mikrobielle Eisenreduktion

In tonhaltigen Materialien können eine Vielzahl von Mikroorganismen unter anaeroben Bedingungen aktiv sein. Da hier die scharfe Temperaturgrenze entfällt, die bei hochspezialisierten halophilen Mikroben beobachtet werden kann, werden nachfolgend die Temperaturgrenzen der wesentlichen Stoffwechselwege (Sulfatreduzierung, Eisenreduktion, Methanogenese, Fermentation) dargestellt (Abb. 5.3). Die mikrobielle Reduktion von Fe(III), die im Ton von besonderer Bedeutung ist, resultiert in einer Reduktion der Sorptionsfähigkeit. Die mikrobielle Aktivität von Eisenreduzierern nimmt mit der steigenden Temperatur bis ca. 130 °C /KAS 03/, /KAS 08/ stark nichtlinear ab. Zwar konnte bei 130 °C durch /KAS 03/ kein Wachstum der Mikroben beobachtet werden, jedoch setzte dieser bei Umsiedlung in ein Medium mit 103 °C erneut ein. Ein aktiver Metabolismus kann daher auch bei 130 °C unterstellt werden. Aufgrund der Wachstumshemmung wird die mikrobielle Aktivität bei dieser Temperatur jedoch zeitlich begrenzt sein, weshalb darüber hinaus keine mikrobielle Aktivität dieser Spezies zu erwarten ist. Für die TUF wird der Verlauf entsprechend einer (invertierten) Normalverteilungsfunktion mit Mittelwert $\mu = 95$ und Standardabweichung $\sigma = 12$

$$k_{\text{IRB}}(\vartheta) = 1 - \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\vartheta - 95 \text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 12 \text{ °C}} \right) \right) / 2. \quad (5.6)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{IRB} [-]: TUF der mikrobiellen Eisenreduktion

erf: Gaußsche Fehlerfunktion

unterstellt. Die TUF repräsentiert die fallende Aktivität der Mikroben bis auf einen Wert von nahezu null bei 130 °C ($\approx \mu + 3\sigma$).

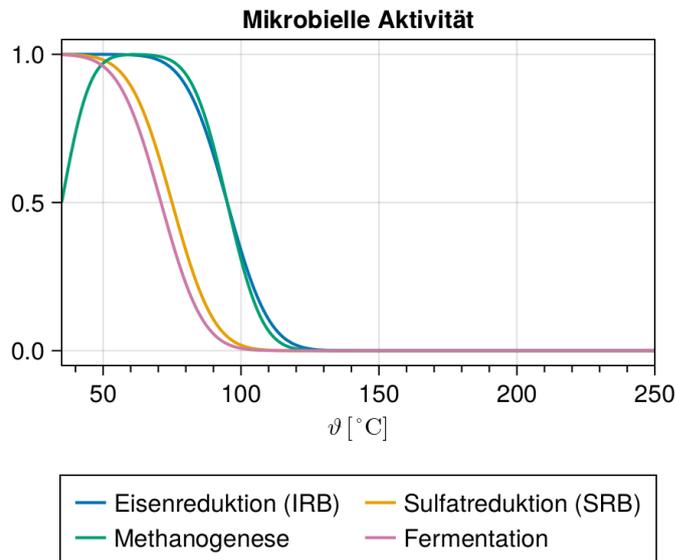


Abb. 5.3 TUF zur mikrobiellen Aktivität

5.1.6 Mikrobielle Sulfatreduktion

Grundsätzlich sind Sulfatreduzierer in unterschiedlichen Temperaturbereichen aktiv und haben speziesabhängige Temperaturoptima. /AME 01/ identifizieren jedoch eine maximale Temperaturtoleranz von 110 °C. Daher nimmt die TUF oberhalb von 110 °C den Wert 0 an. Für niedrigere Temperaturen steigt die TUF und nimmt bei Gebirgstemperatur den Wert 1 an. Für die TUF wird der Verlauf entsprechend einer (invertierten) Normalverteilungsfunktion mit Mittelwert $\mu = 75$ und Standardabweichung $\sigma = 12$

$$k_{\text{SRB}}(\vartheta) = 1 - \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\vartheta - 75 \text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 12 \text{ °C}}\right) \right) / 2 \quad (5.7)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{SRB} [-]: TUF der mikrobiellen Sulfatreduktion

erf: Gaußsche Fehlerfunktion

unterstellt. Die TUF repräsentiert die fallende Aktivität der Mikroben bis auf einen Wert von nahezu null bei 110 °C ($\approx \mu + 3\sigma$).

5.1.7 Methanogenese

Methanogene Archaeen setzen u.a. CO₂ und H₂ zu CH₄ um /PAR 19/ und können zur Reduktion des Gasdrucks in einem Endlager beitragen. Die derzeit bekannte hitzeresistenteste Mikrobenart ist ein Methanogen, das unter einem In-situ-Druck von 20 MPa bis 122 °C wachsen und Methan produzieren kann /TAK 08/. Daher nimmt die TUF ab dieser Temperatur den Wert 0 an. Die Raten der Methanogenese steigen im Temperaturbereich von 0 bis ca. 60 °C exponentiell an /YVO 14/. Für die TUF wird bis 60 °C der Verlauf entsprechend einer Normalverteilungsfunktion mit Mittelwert $\mu_1 = 35$ und Standardabweichung $\sigma_1 = 8$ und oberhalb von 60 °C entsprechend einer (invertierten) Normalverteilungsfunktion mit Mittelwert $\mu_2 = 95$ und Standardabweichung $\sigma_2 = 9$

$$k_{\text{Meth}}(\vartheta) = \begin{cases} \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\vartheta - 35 \text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 8 \text{ °C}}\right)\right) / 2 & 35 \text{ °C} \leq \vartheta < 60 \text{ °C} \\ 1 - \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\vartheta - 95 \text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 9 \text{ °C}}\right)\right) / 2 & 60 \text{ °C} \leq \vartheta \leq 250 \text{ °C} \end{cases} \quad (5.8)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{Meth} [-]: TUF der Methanogenese

erf: Gaußsche Fehlerfunktion

unterstellt. Die TUF repräsentiert die steigende Aktivität der Mikroben bis auf einen Wert von nahezu eins bei 60 °C ($\approx \mu_1 + 3\sigma_1$) und eine anschließend fallende Aktivität bis auf einen Wert von nahezu null bei 122 °C ($= \mu_2 + 3\sigma_2$).

5.1.8 Fermentation

Bei der Fermentation werden organische Bestandteile ohne die Einbeziehung externer Elektronenakzeptoren wie Sauerstoff (O₂) oder Sulfat (SO₄²⁻) umgesetzt, d.h. sie sind nur von der Anwesenheit organischer Stoffe abhängig. Die Temperaturobergrenze, bis zu der diese Umsetzung erfolgt, liegt derzeit bei 104 °C /OH 03/. Für die TUF wird der Verlauf entsprechend einer (invertierten) Normalverteilungsfunktion mit Mittelwert $\mu = 70$ und Standardabweichung $\sigma = 12$

$$k_{\text{Ferment}}(\vartheta) = 1 - \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\vartheta - 70 \text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 12 \text{ °C}}\right)\right) / 2 \quad (5.9)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{Ferment} [-]: TUF der Fermentation

erf: Gaußsche Fehlerfunktion

unterstellt. Die TUF repräsentiert die fallende Aktivität der Mikroben bis auf einen Wert von nahezu null bei 104 °C ($\approx \mu + 3\sigma$).

5.1.9 Karbonatzersetzung

Durch eine temperaturabhängige Reaktion von Tonmineralen und Karbonatmineralen in tonhaltigen Materialien kommt es zur Freisetzung von CO₂. Diese Reaktion erhöht die Gasmenge im ELS. Die zugehörige TUF basiert auf dem temperaturabhängigen Anstieg des Partialdrucks von CO₂ in Sedimentgesteinen. Eine Parameteranpassung der Messdaten in /COU 98/ (Abb. 5.4) führt zu dem Zusammenhang

$$k_{\text{Karbo}}(\vartheta) \propto \exp\left(-8,33333 \cdot 10^{-5} \left(\frac{\vartheta}{^{\circ}\text{C}}\right)^2 + 0,045 \left(\frac{\vartheta}{^{\circ}\text{C}}\right) - 3,666666667\right). \quad (5.10)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{Karbo} [-]: TUF der Karbonatzersetzung

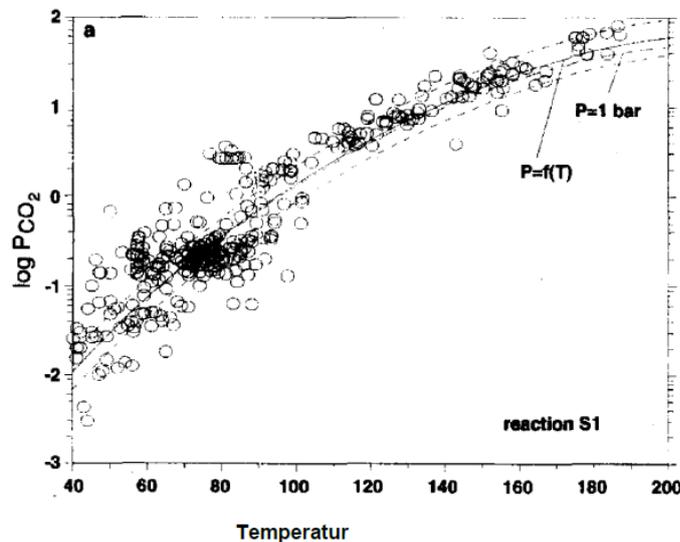


Abb. 5.4 Temperaturabhängigkeit des CO₂-Partialdrucks in Sedimentformationen nach /COU 98/

5.1.10 Mineralumwandlung

Aufgrund der elementspezifischen Ausprägung der Temperaturabhängigkeit von Mineralumwandlungen ist die Formulierung einer entsprechenden TUF nur standortabhängig

möglich. Daher wird diese TUF hier nur als Platzhalter genannt und kann ggf. zu einem späteren Zeitpunkt im Standortauswahlverfahren und bei Kenntnis der Standortspezifika ergänzt werden.

5.1.11 Thermochemische Sulfatreduktion

Je nach geochemischen Randbedingungen sind Temperaturen von 100 – 140 °C genauso wie 160 – 180 °C möglich, um den Prozess zu initiieren /MAC 01/, /BRA 19/. Hier wurden aufgrund der Standortabhängigkeit näherungsweise 120 °C /CAI 22/ angesetzt. Für die thermochemische Sulfatreduktion wird in /TRU 14/ eine Erhöhung der Reaktionsgeschwindigkeit nach einem Arrhenius-Gesetz mit der Aktivierungsenergie $E_A = 130 \cdot 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$ angenommen. Daraus ergibt sich für die TUF der Zusammenhang

$$k_{\text{TSR}}(\vartheta) \propto \exp\left(\frac{-130 \cdot 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot (\vartheta + 273 \text{ °C})}\right) \quad (5.11)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{TSR} [-]: TUF der thermochemischen Sulfatreduktion

$R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$: universelle Gaskonstante

5.1.12 Lösungsdruck

Mit der TUF „Lösungsdruck“ wird die Erhöhung des Druckes von Lösung im ELS in Abhängigkeit von der Temperatur berücksichtigt. Der funktionale Zusammenhang basiert auf thermodynamischen Daten von Wasser nach der Formulierung IAPWS-95 der International Association for the Properties of Water and Steam /WAG 02/. Mithilfe des Python-Paketes `iapws` /GOM 21/ und dem zugehörigen Modul `iapws.iapws95` wurde der Druck von flüssigem Wasser bei einer Dichte von 1000 kg/m³ im betrachteten Temperaturintervall berechnet. Fitting der Daten durch ein Polynom dritten Grades ergibt den Zusammenhang

$$\frac{p(\vartheta)}{\text{MPa}} = -1,22469 \cdot 10^{-5} \left(\frac{\vartheta}{\text{°C}}\right)^3 + 0,00786794 \left(\frac{\vartheta}{\text{°C}}\right)^2 + 0,475555206 \frac{\vartheta}{\text{°C}} - 13,3122172 \quad (5.12)$$

ϑ [°C]: Temperatur

p [MPa]: Temperaturabhängigkeit des Druckes von Wasser bei konstantem Volumen

5.1.13 Gasdruck

Analog zum Lösungsdruck repräsentiert die TUF „Gasdruck“ die Temperaturabhängigkeit des Druckes einer konstanten Gasmenge bei konstantem Volumen. Entsprechend der idealen Gasgleichung ist dieser Zusammenhang linear:

$$p(\vartheta) \propto (\vartheta + 273^{\circ}\text{C}). \quad (5.13)$$

ϑ [°C]: Temperatur

p [-]: Temperaturabhängigkeit des Druckes eines idealen Gases bei konstantem Volumen (bis auf einen Faktor)

5.1.14 Mechanisch induzierte H₂-Bildung

Durch mechanische Einwirkung auf Silikatminerale, sei es durch die Kataklyse in der geologischen Vergangenheit, durch Auffahrung oder durch eine Zerkleinerung während der Aufbereitung des Versatzmaterials, entstehen infolge der Spaltung der Si-O-Si-Bindungen freie Si•-Radikale, die eine Reaktion mit Wassermolekülen eingehen und diese unter Bildung von H₂ spalten /STO 22/. Dieser Prozess ist bis ca. 90 °C wirksam, weil bei höheren Temperaturen die bei der mechanischen Einwirkung ebenfalls entstehenden SiO•-Radikale aktiviert werden und H₂-Bildung durch eine Reaktion mit Produkten der Wasserspaltung verhindern.

Bis zu einer Temperatur von 90 °C basiert die TUF auf einem Fit der Versuchsdaten aus /STO 22/, Fig. 1

$$k_{\text{mH}_2}(\vartheta) \propto 7,30038 \cdot 10^{-8} \left(\frac{\vartheta}{^{\circ}\text{C}}\right)^3 - 3,41797 \cdot 10^{-6} \left(\frac{\vartheta}{^{\circ}\text{C}}\right)^2 + 3,14360 \cdot 10^{-4} \left(\frac{\vartheta}{^{\circ}\text{C}}\right) - 2,32573 \cdot 10^{-3} \quad (5.14)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{mH_2} [-]: TUF der mechanisch induzierten H₂-Bildung

und nimmt für höhere Temperaturen den Wert 1 an.

5.1.15 Pyrolyse

Die Pyrolyse des Kerogens führt oberhalb von 150 °C zur Freisetzung von CO₂ und trägt damit zur Gasmenge im ELS bei. Die TUF bildet den Kurvenverlauf der CO₂-Produktion durch Pyrolyse in Abb. 5.5 nach. Zwischen 150 °C und 180 °C wird ein quadratischer Verlauf mit fallendem Anstieg bis auf null und einem maximalen Wert von 0,45 bei 180 °C und zwischen 180 °C und 250 °C wird ein quadratischer Verlauf mit steigendem Anstieg von null beginnend bis auf den Wert eins bei 250 °C angenommen. Es ergibt sich die Funktion

$$k_{\text{Pyro}}(\vartheta) = \begin{cases} 0, & 35 \text{ °C} \leq \vartheta < 150 \text{ °C} \\ 0,45 \cdot \left(1 - \left(\frac{\vartheta - 180 \text{ °C}}{150 \text{ °C} - 180 \text{ °C}}\right)^2\right), & 150 \text{ °C} \leq \vartheta < 180 \text{ °C} \\ 0,45 + 0,55 \cdot \left(1 - \left(\frac{\vartheta - 180 \text{ °C}}{250 \text{ °C} - 180 \text{ °C}}\right)^2\right) & 180 \text{ °C} \leq \vartheta \leq 250 \text{ °C} \end{cases} \quad (5.15)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{Pyro} [-]: TUF der Pyrolyse

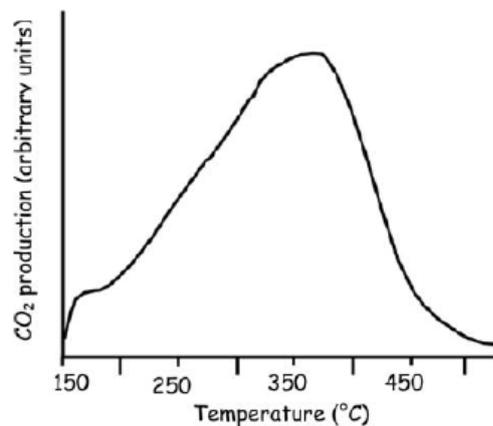


Abb. 5.5 Temperaturabhängigkeit der CO₂-Produktion durch Kerogenpyrolyse nach /BRU 12/

5.1.16 Thermolabile Organika

Durch Temperaturzunahme können an Organika gebundene Gase wie CO₂ und H₂S (thermolabile Phase) freigesetzt werden. Untersuchungen durch /BRU 12/ zeigen, dass die thermolabile Fraktion bei einer Temperatur von 80 °C zur Hälfte und bei 100 °C nahezu vollständig innerhalb von 200 Jahren freigesetzt wird. Für den Verlauf der TUF wird folglich ein exponentieller Anstieg bis 100°C mit dem Wert 0,5 bei 80°C entsprechend

$$k_{\text{TLO}}(\vartheta) \propto \exp\left(-\frac{100\text{ °C} - \vartheta}{100\text{ °C} - 80\text{ °C}} \cdot \ln 2\right) \quad (5.16)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{TLO} [-]: TUF der thermolabilen Organika

angenommen. Oberhalb von 100°C erhält die TUF wegen der erwarteten vollständigen Freisetzung der thermolabilen Fraktion den Wert 1.

5.1.17 CO₂-Desorption

Tone können CO₂, das während ihrer geologischen Vorgeschichte absorbiert wurde, bei Temperaturerhöhung desorbieren. Der Prozess setzt nach /YES 17/ bei etwa 50 °C ein, erreicht sein Maximum bei etwa 130°C und endet bei etwa 200 °C (Abb. 5.6). Dieser Verlauf kann näherungsweise durch die Verteilungsfunktion der Normalverteilung mit Mittelwert 130 und Standardabweichung 20 beschrieben werden. Die zugehörige TUF repräsentiert die dabei insgesamt freigesetzte Gasmenge und wird dementsprechend durch die zugehörige kumulative Verteilungsfunktion

$$k_{\text{Desor}}(\vartheta) = \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\vartheta - 130\text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 20\text{ °C}}\right)\right) / 2. \quad (5.17)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{Desor} [-]: TUF der CO₂-Desorption

erf: Gaußsche Fehlerfunktion

dargestellt.

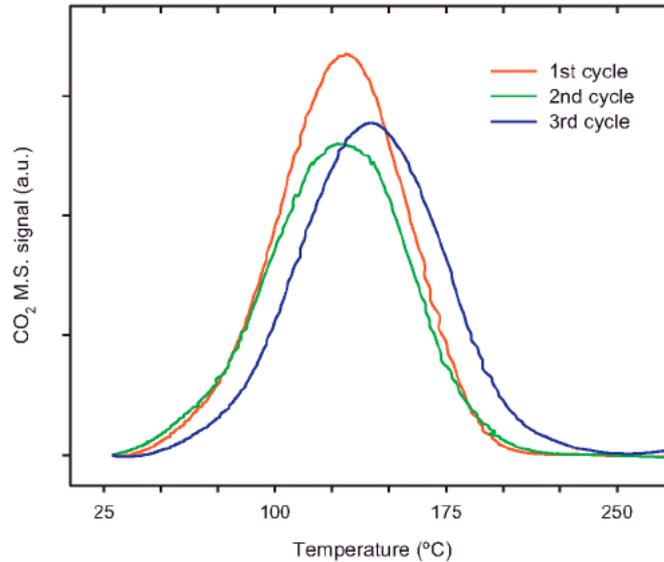


Abb. 5.6 Temperaturabhängigkeit der CO₂-Desorption nach /YES 17/

5.1.18 H₂-induzierte Pyrit-Reduktion

Bei Temperaturen oberhalb von 90 °C und H₂-Partialdrücken oberhalb von 1 MPa kann es innerhalb kürzester Zeit durch H₂ zu einer Reduzierung von Pyrit (FeS₂) in Pyrrhotite (FeS_{1+x}) mit gleichzeitiger Freisetzung von (1-x) Mol Hydrogensulfid pro Mol Pyrit kommen /TRU 13/. Daher wird als TUF die Sprungfunktion

$$k_{\text{Pyrit}}(\vartheta) = \begin{cases} 0, & 35 \text{ °C} \leq \vartheta < 90 \text{ °C} \\ 1, & 90 \text{ °C} \leq \vartheta < 250 \text{ °C} \end{cases} \quad (5.18)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{Pyrit} [-]: TUF der H₂-induzierten Pyrit-Reduktion

betrachtet.

5.1.19 Korrosionsrate durch H₂S

Die TUF „Korrosionsrate durch H₂S“ ergibt sich aus Daten zur temperaturabhängigen Korrosion durch H₂S in /QI 14/ und /GAO 17/. Aus /QI 14/, Fig. 1 wurden Messwerte für die Korrosion eines Stahls in H₂S-gesättigter 5 %-iger NaCl-Lösung bei 40 °C, 60 °C und 90 °C berücksichtigt und aus /GAO 17/, Fig. 1 Messwerte für die Korrosion eines Karbonstahls, der sich für jeweils vier Tage in 0,00385-molarer H₂S-Lösung bei Temperaturen zwischen 80 °C und 200 °C befand. Aus diesen Werten wurde für den Verlauf der

TUF geschlossen, dass sich die Korrosionsrate zwischen 35 °C und 60 °C auf 1/3 des Anfangswertes, bis 90 °C auf 1/4 des Anfangswertes, zwischen 90°C und 160 °C nochmals um die Hälfte reduziert und zwischen 160 °C und 200 °C kaum noch eine Änderung der Korrosionsrate erfolgt. Eine entsprechende Parameteranpassung dieser Annahmen an ein Potenzgesetz führt zu der TUF

$$k_{\text{KorrH}_2\text{S}}(\vartheta) \propto 94,428 \left(\frac{\vartheta}{^\circ\text{C}} \right)^{-1,321} \quad (5.19)$$

ϑ [°C]: Temperatur

$k_{\text{KorrH}_2\text{S}}$ [-]: TUF der Korrosion durch H_2S (bis auf vertikale Verschiebung und Skalierung)

5.1.20 Versprödungsrate

Diese primäre TUF kann zum jetzigen Zeitpunkt aufgrund der fehlenden Erkenntnisse zur Temperaturabhängigkeit des abzubildenden Prozesses nicht mathematisch beschrieben werden.

5.1.21 Viskosität

Für die Temperaturabhängigkeit der Viskosität von Lösung wird eine empirische Funktion für NaCl-Lösung nach /PHI 81/, S. 5f. in der Form

$$\eta_{\text{Lös}}(\vartheta) = \eta_{\text{W}}(\vartheta) \cdot \left(1 + am + bm^2 + cm^3 + d\vartheta(1 - \exp(km)) \right) \quad (5.20)$$

ϑ [°C]: Temperatur

η_{W} [cP]: Viskosität von Wasser

$\eta_{\text{Lös}}$ [cP]: Viskosität von NaCl-Lösung

$a = 0,0816$: empirischer Parameter

$b = 0,0122$: empirischer Parameter

$c = 0,000128$: empirischer Parameter

$d = 0,000629$: empirischer Parameter

$k = -0,7$: empirischer Parameter

$m = 0,2$: molare Konzentration NaCl [mol NaCl / kg H_2O]

verwendet. Die Temperaturabhängigkeit der Viskosität von Wasser η_{W} wurde dabei für den Temperaturbereich [35°C, 250°C] aus /PHI 81/, Tab. 1 ermittelt. Eine exponentielle Datenanpassung ergab hierbei den Zusammenhang

$$\eta_W(\vartheta) = 0,0204 \text{ cP} \left(\frac{\vartheta}{^\circ\text{C}} \right)^{-0.942} \quad (5.21)$$

ϑ [°C]: Temperatur

η_W [cP]: Viskosität von Wasser

Für die Viskosität von Gasen wird basierend auf der kinetischen Gastheorie der Zusammenhang

$$\eta_{\text{Gas}}(\vartheta) \propto \sqrt{\vartheta + 273^\circ\text{C}} \quad (5.22)$$

ϑ [°C]: Temperatur

η_{Gas} : Viskosität des idealen Gases (bis auf einen Faktor)

angenommen.

5.1.22 Dichte

Für die Temperaturabhängigkeit der Dichte für NaCl-Lösung wird eine empirische Funktion nach /PHI 81/, S. 14f. in der Form

$$x(\vartheta) = c_1 \cdot \exp(a_1 m) + c_2 \cdot \exp(a_2 \vartheta) + c_3 \cdot \exp(a_3 p), \quad (5.23)$$

$$\rho(\vartheta) = A + B \cdot x(\vartheta) + C \cdot x^2(\vartheta) + D \cdot x^3(\vartheta)$$

ϑ [°C]: Temperatur

x [-]: empirische Funktion

ρ [g/cm³]: Dichte von NaCl-Lösung

$c_1 = -9,9595$: empirischer Parameter

$c_2 = 7,0845$: empirischer Parameter

$c_3 = 3,9093$: empirischer Parameter

$a_1 = -0,004539$: empirischer Parameter

$a_2 = -0,0001638$: empirischer Parameter

$a_3 = 0,00002551$: empirischer Parameter

$A = -3,033405$: empirischer Parameter

$B = 10,128163$: empirischer Parameter

$C = -8,750567$: empirischer Parameter

$D = 2,661307$: empirischer Parameter

$p = 70$: Druck [bar]

$m = 0,2$: molare Konzentration NaCl [mol NaCl / kg H₂O]

verwendet.

5.1.23 Rückhaltung

Diese primäre TUF kann zum jetzigen Zeitpunkt aufgrund der fehlenden Erkenntnisse zur Temperaturabhängigkeit des abzubildenden Prozesses bzw. seines elementspezifischen Charakters nicht mathematisch beschrieben werden.

5.1.24 Diffusionskoeffizient

Die Temperaturabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten für Lösungen hat nach der Stokes-Einstein-Gleichung /EIN 05/ die Form

$$D_{\text{Lös}}(\vartheta) \propto \frac{\vartheta + 273^{\circ}\text{C}}{\eta_{\text{Lös}}(\vartheta)}, \quad (5.24)$$

ϑ [°C]: Temperatur

$\eta_{\text{Lös}}$ [cP]: Viskosität von NaCl-Lösung

$D_{\text{Lös}}$: Diffusionskoeffizient von Lösung (bis auf einen Faktor)

wobei die oben angegebene Temperaturabhängigkeit der Viskosität verwendet wird. Für Gase wird wiederum nach der Chapman-Enskog-Theorie /CHA 70/ (und unter Annahme idealer Gase) der Zusammenhang

$$D_{\text{Gas}}(\vartheta) \propto \frac{(\vartheta + 273^{\circ}\text{C})^{\frac{3}{2}}}{p(\vartheta)} \propto \sqrt{\vartheta + 273^{\circ}\text{C}} \quad (5.25)$$

ϑ [°C]: Temperatur

$\eta_{\text{Lös}}$ [cP]: Viskosität von NaCl-Lösung

D_{Gas} : Diffusionskoeffizient des idealen Gases (bis auf einen Faktor)

verwendet.

5.1.25 RN-Konzentration

Diese primäre TUF kann zum jetzigen Zeitpunkt aufgrund der fehlenden Erkenntnisse zur Temperaturabhängigkeit des abzubildenden Prozesses bzw. seines elementspezifischen Charakters nicht mathematisch beschrieben werden.

5.1.26 Thermische Osmose

Diese primäre TUF kann zum jetzigen Zeitpunkt aufgrund der fehlenden Erkenntnisse zur Temperaturabhängigkeit des abzubildenden Prozesses bzw. seines elementspezifischen Charakters nicht mathematisch beschrieben werden.

5.1.27 Bewertung des Wissenstandes zu den primären TUF

Die Bewertung der primären TUF für das Wirtsgestein Kristallingestein hinsichtlich der Verfügbarkeit einer mathematischen Beschreibung, der Standort- / Einlagerungskonzeptspezifik der TUF bzw. des Auftretens eines oder mehrerer zur TUF beitragender Prozesse, der Verwendung der Expertenmeinung bei der Herleitung der mathematischen Beschreibung der TUF bzw. der Notwendigkeit von Forschungsarbeiten zur Verbesserung des Kenntnisstandes über die mathematische Beschreibung der TUF wird in Tab. 5.2 zusammengefasst. Es weist die Aussage „ja / nein“ in der Spalte „Beschreibung/Auftreten Standort- oder ELK-abhängig“ für die primäre TUF „Korrosionsrate durch H_2S “ darauf hin, dass die mathematische Beschreibung der TUF von dem Behältermaterial, z. B. Kupfer, Stahl oder Gusseisen, aber auch von der Art deren Herstellung abhängt und somit einlagerungskonzeptabhängig ist, während das Auftreten des beitragenden assoziierten Prozesses „Korrosionsrate durch H_2S “ für alle Kristallingesteine vorausgesetzt wird. Die Aussage „nein / ja“ in dieser Spalte für die primäre TUF „Karbonatzersetzung“ weist hingegen darauf hin, dass die mathematische Beschreibung der TUF, die aus In-situ-Beobachtungen abgeleitet wurde, an allen Standorten Bestand hat, wobei durch die Verwendung eines karbonatmineraalfreien Bentonits das Auftreten des beitragenden assoziierten Prozesses „Zersetzung von Karbonatmineralen“ zumindest in der Komponente Versatz vermieden werden kann.

Tab. 5.2 Bewertung der primären TUF für das Wirtsgestein Kristallin

Primäre TUF	Beschreibung verfügbar	Beschreibung/ Auftreten Standort- oder ELK*-abhängig	Experten- meinung verwendet	Forschungs- bedarf
<i>integritätsrelevante TUF</i>				
Quellen	ja	ja / nein	nein	nein
Smektit-Illitisierung	ja	nein / nein	nein	nein
Wasserdampfteinwirkung	ja	nein / nein	nein	nein
Quarzzementation	ja	nein / nein	nein	nein
Mikrobielle Eisenreduktion	ja	nein / nein	ja	nein
Mikrobielle Sulfatreduktion	ja	nein / nein	ja	nein
Mikrobielle Eisenreduktion	ja	nein / nein	ja	nein
Methanogenese	ja	nein / nein	ja	nein
Fermentation	ja	nein / nein	ja	nein
Karbonatzersetzung	ja	nein / ja	nein	ja
Mineralumwandlung	nein	ja / nein	nein	ja
Thermochemische Sulfatreduktion	ja	nein / nein	nein	nein
Lösungsdruck	ja	nein / nein	nein	nein
Gasdruck	ja	nein / nein	nein	nein
Mechanisch induzierte H ₂ -Bildung	ja	nein / ja	ja	nein
Pyrolyse	ja	nein / ja	nein	nein
Thermolabile Organika	ja	nein / ja	ja	nein
CO ₂ -Desorption	ja	nein / ja	ja	nein

Primäre TUF	Beschreibung verfügbar	Beschreibung/ Auftreten Standort- oder ELK*-abhängig	Expertenmeinung verwendet	Forschungsbedarf
H ₂ -induzierte Pyrit-Reduktion	ja	ja / ja	ja	nein
Korrosionsrate durch H ₂ S	ja	ja / nein	nein	nein
Versprödungsrate	nein	ja / nein	nein	ja
<i>RN-transportrelevante TUF</i>				
Viskosität	ja	nein / nein	nein	nein
Dichte	ja	nein / nein	nein	nein
Rückhaltung	nein	ja / nein	nein	ja
Diffusionskoeffizient	ja	nein / nein	nein	nein
RN-Konzentration	nein	ja / nein	nein	nein
Thermische Osmose	nein	nein / nein	nein	ja

*Endlagerkonzept

In der Tab. 5.1 wurde die Aufteilung der primären TUF in integritätsrelevante und RN-transportrelevante TUF vorgenommen, die in dieser Form bereits bei der Zuordnung der TUF anhand der Priorisierungsargumentation und basierend auf der Zugehörigkeit der RN-transportrelevanten TUF als unabhängige Größen der Transportgleichung (inklusive des Terms für thermische Osmose) erfolgte. Eingangs dieses Kapitels wurde außerdem erwähnt, dass auch die temperaturabhängige Größe Porosität in diese Gleichung über den effektiven Diffusionskoeffizienten sowie die Permeabilität mit einfließt. Bei der Ausarbeitung des vorliegenden Ansatzes wurde festgestellt, dass die temperaturbedingte Änderung der Porosität ausschließlich durch integritätsrelevante TUF abgebildet wird. Einerseits disqualifiziert – entsprechend der Definition einer TUF – die Abhängigkeit von den bestehenden primären TUF die Porosität als eine primäre TUF, andererseits belegt diese Abhängigkeit eine indirekte Einflussnahme der integritätsrelevanten TUF auf den RN-Transport. Der Umgang mit der Porosität und anderen ähnlichen Einflussgrößen wird im nächsten Kapitel beschrieben.

5.2 Bilanzierungsgrößen

Wie im vorangehenden Kapitel ausgeführt, wurden bei der Auswertung der Priorisierungsargumentation und der Zuordnung der primären TUF die in der Tab. 5.3 zusammengefassten, temperaturabhängigen *Bilanzierungsgrößen* identifiziert. Bilanzierungsgrößen sind keine primären TUF, werden jedoch zusammen mit diesen in der Untersuchung der Temperaturunverträglichkeit – wie im nachfolgenden Unterkapitel beschrieben – eingesetzt und stellen wichtige Bausteine des vorliegenden Ansatzes dar. Ihre Benennung rührt daher, dass sie eine Bilanz der beitragenden primären TUF – durch das Aufsummieren der Produkte dieser primären TUF mit ihren jeweiligen maximalen Beiträgen – abbilden. Dies ist für das Erzielen eines quantitativ austarierten Ergebnisses im Rahmen des Ansatzes sogar Voraussetzung. Insofern stellen die Bilanzierungsgrößen eine Verbindung zwischen diesem zweckgebundenen vereinfachten Ansatz und einer bilanzierenden Modellierung der Nahfeldentwicklung während des Temperaturimpulses in einem Endlager her. Eine der Beobachtungen der bisherigen Anwendung des Ansatzes ist, dass ausschließlich integritätsrelevante primäre TUF zu Bilanzierungsgrößen beitragen. Es ist ferner festzustellen, dass durch eine gezielte Auswahl des Versatzmaterials, welches z.B. vernachlässigbare Gehalte an Karbonat, Organik und Pyrit enthält (vgl. die entsprechende Prämisse im Kapitel 2.3), einzelne Beiträge zu Bilanzierungsgrößen deutlich reduziert werden können.

Tab. 5.3 Identifizierte Bilanzierungsgrößen mit den beitragenden primären TUF

Bilanzierungsgröße	Beeinflusste Komponente	Beitragende primäre TUF
Porosität	BB.01	Quellen, Smektit-Illitisierung, Quarzzementation, Karbonatzersetzung, Mineralumwandlung, Pyrolyse, H ₂ -induzierte Pyrit-Reduktion
Gasmenge	WP.00/ BB.01	Korrosionsrate (nur BB.01), Korrosionsrate durch H ₂ S (nur BB.01), Karbonatzersetzung, Thermochemische Sulfatreduktion, Mikrobielle Sulfatreduktion, Mikrobielle Eisenreduktion, Methanogenese, Fermentation, Mechanisch induzierte H ₂ -Bildung, Pyrolyse, CO ₂ -Desorption, Thermolabile Organika, H ₂ -induzierte Pyrit-Reduktion
H ₂ S-Menge	WP.00/ BB.01	Thermochemische Sulfatreduktion, Mikrobielle Sulfatreduktion, Thermolabile Organika, H ₂ -induzierte Pyrit-Reduktion

5.2.1 Porosität⁵

Für die Bilanzierungsgröße „Porosität“ kann für den Bentonitversatz⁶ der Anfangswert von 35 Volumen-% bei einer Trockendichte von 1,75 g/cm³ /JOB 21/ angenommen werden. Dieser Wert unterscheidet sich von der Porosität von 43 Volumen-% bei einer Trockendichte von 1,57 g/cm³ /KAR 06/ im schwedischen KBS-3 Einlagerungskonzept. Die Ergebnisse der THM-Simulationen /RUT 14/, /VIL 16/ zeigen, dass sich die mittlere Porosität eines Bentonitversatzes aufgrund des Quellens in den behälterfernen Schichten und des ausbleibenden Quellens in den behälternahen Schichten innerhalb des thermischen Impulses nicht ändert (Abb. 5.7). Daher wird für den Versatz kein Beitrag der TUF „Quellen“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ ausgewiesen.

⁵ siehe Datenblatt „Berechnungen- Kristallin“ in der Datenbank zur detaillierten Ableitung der Beiträge der einzelnen TUF zu dieser Bilanzierungsgröße.

⁶ In der Bilanzierung wird das Referenzmaterial des mKBS-3 Einlagerungskonzeptes – Ca-Bentonit vom Typ Salzdetfurth /JOB 21/, der dem bayerischen Bentonit B25 /UFE 08/, /KAU 12/ entspricht, als Versatzmaterial angenommen.

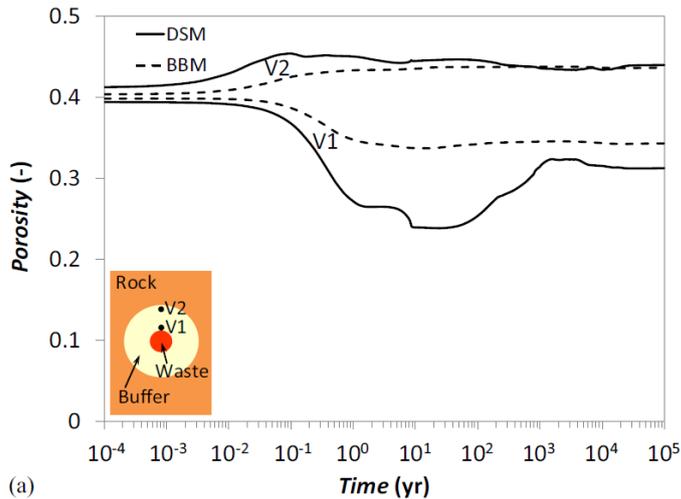


Abb. 5.7 Modellhafte Entwicklung der Porosität in einem Bentonitversatz in einem Endlager im Opalinuston /VIL 16/

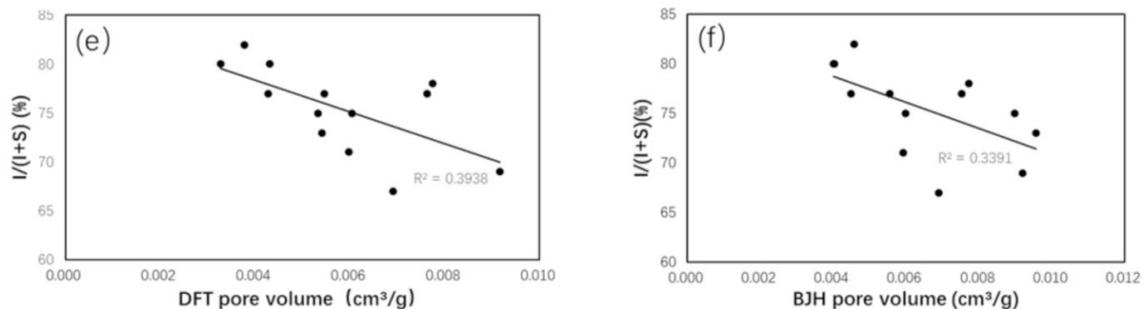


Abb. 5.8 Änderung des Porenvolumens mit dem Illit-Anteil in der Illit-Smektit-Wechsellagerung in einem Tongestein /HUC 21/

Da für einen Bentonitversatz in einer Kristallinformation zwei Einflussfaktoren, die die Smektit-Illit-Reaktion beschleunigen – erhöhte Salinität und einlagerungskonzeptspezifisch Alkalinität /BRA 19/ – nicht greifen, kann im Vergleich zu einem Endlagerstandort im Tongestein /CZA 23a/ eine verminderte Smektit-Illit-Reaktion im Versatz bei erhöhten Temperaturen angenommen werden. Entsprechend der Diskussion bei /BRA 19/ zur Smektit-Illit-Reaktion in Bentonitformationen kann innerhalb des Temperaturimpulses eine Umwandlung von 50 bis 70 % der Smektite in Illit (mit der dann vorherrschenden R1- und R3-Ordnung der Illit-Smektit-Wechsellagerungen) bei der maximalen hier betrachteten Temperatur nicht ausgeschlossen werden. Für eine Kristallinformation wird daher, im Unterschied zum Wert von 70 % für das Tongestein /CZA 23a/, der Wert von 50 % angenommen. Aus der Abb. 5.8 lässt sich ein Porositätsvolumen von ca. 0,05 cm³ pro g Smektit bei 0 % Illit in der Illit-Smektit-Wechsellagerung extrapolieren. Die Zunahme des Illit-Anteils auf 50 % entspricht dann im Bentonitversatz mit einer Dichte von

1,75 g/cm³ und einem Smektit-Anteil von 43 % /UFE 08/ einer Abnahme der assoziierten Porosität von ca. 4 Volumen-% auf ca. 2 Volumen-%. Dementsprechend wird der maximale Beitrag der TUF „Smektit-Illitisation“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ im Versatz auf -2 Volumen-% quantifiziert.

Der Beitrag der TUF „Quarzzementation“ zur Porositätsabnahme wird durch die TUF „Smektit-Illitisation“ berücksichtigt, weil die Quarzbildung aus der Smektit-Illit-Reaktion erfolgt /BRA 19/. Die Beeinträchtigung des Quellverhaltens der verbleibenden quellfähigen Smektite durch die Quarzzementation stellt jedoch einen zusätzlichen Effekt dar. Da allerdings das Quellen des Bentonits die Porosität im Versatz bereits nach wenigen Hundert Jahren nicht mehr verändert (Abb. 5.7), kann der ggf. mögliche indirekte Beitrag der TUF „Quarzzementation“ über die TUF „Quellen“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ im Versatz in erster Näherung vernachlässigt werden.

Da der Karbonatgehalt und der Pyritgehalt des bayerischen Calcigel-Bentonits gleich Null sind /UFE 08/, /KAU 08/, tragen die TUF „Karbonatzersetzung“ und die TUF „H₂-induzierte Pyrit-Reduktion“ nicht zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ bei.

Der maximale Beitrag der TUF „Pyrolyse“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ im Versatz kann ausgehend aus dem Organik-Gehalt von 0,1 % des bayerischen Calcigel-Bentonits /KAU 08/ und daraus, dass die Gasproduktion durch Pyrolyse im Temperaturbereich von 150 bis 250 °C unterhalb von ca. 20 % der Gesamtgasproduktion durch Pyrolyse des Kerogens liegt /BRU 12/, auf ca. 0,02 Volumen-% geschätzt werden.

Die Mineralumwandlung kann je nach Art der Minerale die Porosität ebenfalls beeinflussen. Allerdings ist dieser Einfluss standortabhängig und, im Fall vom Versatz, auch einlagerungskonzeptabhängig und kann in der vorliegenden Analyse nicht quantifiziert werden.

Zusammenfassend ist die Bilanzierung der Porosität im Versatz in Abb. 5.9 dargestellt.

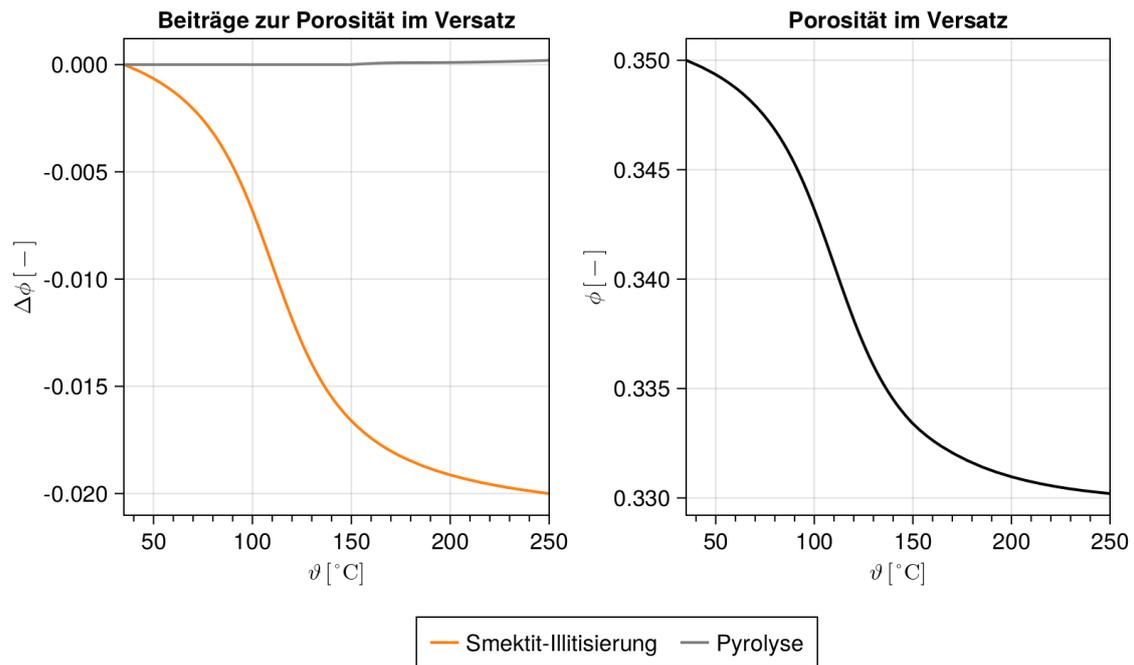


Abb. 5.9 Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) im Versatz

5.2.2 Lösungsmenge

Eine Bilanzierung der für die Korrosionsreaktion der Behälter notwendigen Lösungsmenge erfolgt (im Gegensatz zum Wirtsgestein Steinsalz) für ein Endlager im Kristallin nicht, da im Versatz von einer dafür ausreichenden Lösungsverfügbarkeit am Behälter ausgegangen werden kann /KAR 06/. Die Lösungsmenge ergibt sich als Differenz der Bilanzierungsgrößen „Porosität“ und „Gasmenge“ im Versatz. Es wird entsprechend /SEN 08/ und der zuvor in diesem Unterkapitel bei der Diskussion des Beitrages des Quellens zur Porosität erwähnten Arbeiten davon ausgegangen, dass ab einem bestimmten minimalen Abstand vom Behälter eine durchgehende – d. h. nicht von einer Gasphase großräumlich unterbrochene – Lösungsphase im Porenraum des Versatzes existiert.

5.2.3 Gasmenge⁷

Ausgehend aus der obigen Diskussion zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ wird für die Quantifizierung der Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ der Porositätsanfangswert von 35 Volumen-% im Versatz als Berechnungsgrundlage verwendet. Der Einbringsättigung des Versatzes kann am Beispiel des In-situ-Versuches LOT A2 in Äspö UTL auf 0,48 /SAL 14/ festgelegt werden und entspricht einem Gasvolumen von 14 Volumen-%. Die aeroben Bakterien können innerhalb von einigen Monaten bzw. wenigen Jahren den Sauerstoff, welcher 22 % des Gasvolumens im Versatz beiträgt, verbrauchen /PUI 01/, sodass das danach verbleibende Gas nahezu ausschließlich aus N₂ besteht und ein Anfangsvolumen von 11 Volumen-% aufweist. Bezogen auf 1 m³ Ton entspricht dieser Wert dem Anfangswert von 3,1 Mol der Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ im Versatz.

Die Korrosion der äußeren Kupferschicht des Behälters bei niedrigen anzunehmenden Chlorid-Konzentrationen im Grundwasser von Kristallinformationen in Deutschland erfolgt ausschließlich entsprechend der Reaktion $2\text{Cu(s)} + \text{H}_2\text{S} + \text{H}^+ \rightleftharpoons \text{Cu}_2\text{S(s)} + \text{H}_2\text{(g)}$ /WER 92/. Die H₂S-Zufuhr innerhalb von 30.000 Jahren des Temperaturimpulses kann mangels repräsentativer Daten für einen Standort in Deutschland aus der Flussrate des Grundwassers von 0,3 m³/Jahr pro m² des Behälters und der H₂S-Konzentration von bis zu 0,029 Mol/m³ im Grundwasser, die für Kristallinformationen in einer Tiefe von 500 m in Schweden repräsentativ sind /WER 92/, auf 0,3 Mol pro 1 m³ Versatz abgeschätzt werden. Diese Zufuhr hängt allerdings nicht von der Temperatur des Behälters ab und wird in der Analyse der Temperaturunverträglichkeit nicht berücksichtigt.

Über diese externe H₂S-Quelle hinaus können aufgrund des vernachlässigbaren Schwefelgehaltes im Calcigel-Bentonit /UFE 08/, /KAU 08/ nur zwei weitere H₂S-Bildungsprozesse – mikrobielle und thermochemische Sulfatreduktion –, die im Versatz ablaufen können, identifiziert werden. Diese Prozesse setzen das Vorhandensein des gelösten Sulfats voraus, welches in diesem Fall nur extern zugeführt werden kann. Anhand der Daten in /WER 92/ kann eine Sulfat-Zufuhr von 6,3 Mol pro 1 m³ Versatz innerhalb von 30.000 Jahren angenommen werden.

⁷ siehe Datenblatt „Berechnungen-Kristallin“ in der Datenbank zur detaillierten Ableitung der Beiträge der einzelnen TUF zu dieser Bilanzierungsgröße.

Bei Temperaturen unterhalb von 110°C (siehe oben die Diskussion zur primären TUF „Mikrobielle Sulfatreduktion“) kann dieses gelöste Sulfat mikrobiell – vorausgesetzt werden ausreichende Lebensraumverhältnisse – unter Verwertung von Organik oder H₂ als Elektronenquelle mit einer theoretischen Höchststrate von 0,05 bzw. 0,1 Mol/m³/Jahr in H₂S umgewandelt werden /MA 22/. Der thermochemische Reaktionsweg wird dabei zwar energetisch bevorzugt /THA 77/, verbraucht jedoch 4 Mol H₂ pro 1 Mol des produzierten H₂S und ist daher auf die H₂-Produktion aus der Korrosion mit H₂S aus dem mikrobiellen Reaktionsweg sowie auf die mechanisch induzierte H₂-Bildung (siehe unten, in diesem Unterkapitel) angewiesen. Unter Berücksichtigung des Zusammenspiels der beiden konkurrierenden Reaktionswege ergibt sich der maximale Beitrag der primären TUF „Mikrobielle Sulfatreduktion“ von 6,3 Mol H₂S und -10,7 Mol H₂ pro 1 m³ Versatz.

Entsprechend der vorangehenden konservativen – hinsichtlich der Behälterkorrosion – Annahme, dass die mikrobielle Sulfatreduktion mit einer theoretischen Höchststrate unter Verwertung von Organika oder H₂ innerhalb des gesamten Temperaturimpulses abläuft, wird für die anderen betrachteten mikrobiellen Prozesse, die nicht zur Kupferkorrosion beitragen, eine mangelnde Verfügbarkeit an Energiequellen angenommen. Daher tragen die primären TUF „Mikrobielle Eisenreduktion“, „Fermentation“ und „Methanogenese“ nicht zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ bei.

Eine signifikante thermochemische Sulfatreduktion findet erst bei Temperaturen deutlich oberhalb von 110°C (s. nächste Abb. bzw. nächstes Unterkapitel) statt und überschneidet sich hinsichtlich des Sulfatverbrauches nicht mit der mikrobiellen Sulfatreduktion. Daher entspricht der maximale Beitrag der TUF „Thermochemische Sulfatreduktion“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ der gesamten zugeführten Sulfat-Menge und beträgt 6,3 Mol H₂S pro 1 m³ Versatz.

Da der Karbonatgehalt und der Pyritgehalt des bayerischen Calcigel-Bentonits gleich Null sind /UFE 08/, /KAU 08/, tragen die TUF „Karbonatzersetzung“ und die TUF „H₂-induzierte Pyrit-Reduktion“ nicht zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ bei.

Entsprechend dem CO₂- und H₂S-Gehalt der thermolabilen Organika von bis zu 10 % bzw. 1,7 % der Kerogenmasse im Ton /BRU 12/ kann bei einem Organik-Gehalt von 0,1 % des Calcigel-Bentonits /KAU 08/ von einer Überführung von maximal 0,01 % der Versatzmasse als CO₂ und 0,0017 % als H₂S in die Gasphase ausgegangen werden. Aus diesen Werten ergibt sich der maximale Beitrag der TUF „Thermolabile Organika“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ von 5,4 Mol (davon 1 Mol H₂S) pro 1 m³ Versatz.

Durch die Pyrolyse kann bis 250 °C ca. 20 % der Kerogenmasse in die Gasphase überführt werden. Daraus ergibt sich der maximale Beitrag der TUF „Pyrolyse“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ von 8,7 Mol pro 1 m³ Versatz.

Da der Gehalt an anorganischem Kohlenstoff im bayerischen Calcigel-Bentonit gleich Null ist /KAU 08/, trägt die TUF „CO₂-Desorption“ nicht zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ bei.

Aus der maximalen für Silikatminerale beobachteten, mechanischen Produktion von 3 µmol H₂ pro g Gestein /STO 22/ ergibt sich der Beitrag der TUF „Mechanisch induzierte H₂-Bildung“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ von 5,7 Mol pro 1 m³ Versatz. Da bei dem Bohren des Einlagerungsbohrloches im Kristallingestein, welches überwiegend aus Silikatmineralen besteht, eine durch mechanischen Ausbruch induzierte ALZ mit einer Mächtigkeit von 0,12 m entsteht /SIR 15/, befindet sich der dort mechanisch produzierte H₂ im hydraulischen Kontakt mit dem Versatz und kann dem anteilig – entsprechend dem Porenvolumenverhältnis – zugerechnet werden. Der maximale Beitrag der TUF „Mechanisch induzierte H₂-Bildung“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ beträgt damit 6,7 Mol pro 1 m³ Versatz.

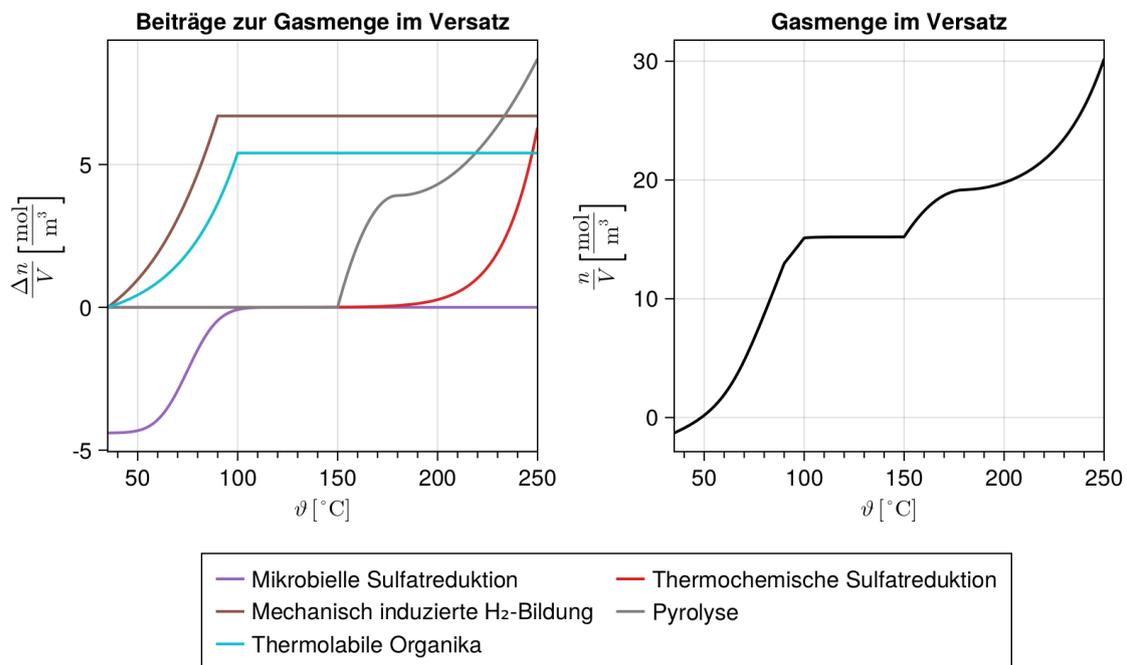


Abb. 5.10 Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Gasmenge (links) und resultierende Gasmenge im Versatz (rechts)

5.2.4 H₂S-Menge⁸

Die Bilanzierungsgröße „H₂S-Menge“ setzt sich aus den Beiträgen der primären TUF „Mikrobielle Sulfatreduktion“, „Thermochemische Sulfatreduktion“ und „Thermolabile Organika“ zusammen. Die maximalen Beiträge dieser TUF wurden im vorherigen Abschnitt abgeleitet und betragen zunächst jeweils 6,3 Mol („Mikrobielle Sulfatreduktion“), 6,3 Mol („Thermochemische Sulfatreduktion“) und 1 Mol („Thermolabile Organika“) pro 1 m³ Versatz. Allerdings können bis zu ca. 0,04 Mol H₂S pro kg Calcigel-Bentonits /PED 17/ bzw. 77 Mol H₂S pro 1 m³ Versatz eine Reaktion mit Fe(III) in der Mineralstruktur des Smektitis eingehen (s. die abgeleitete TUF „Quellfähigkeit“ im Kapitel 5.3.2) und stehen daraufhin nicht mehr der Korrosionsreaktion mit dem Behälter zur Verfügung.

Die Annahme, dass das gesamte H₂S mit dem Fe(III) in der Mineralstruktur des Smektitis reagiert, kann als gerechtfertigt erachtet werden für das Szenario, dass H₂S den Versatz nicht punktuell, sondern großflächig durchströmt. Dieses Szenario wird im Weiteren als **Variante 1** betrachtet. Sollte es jedoch einen oder einige präferenzierte H₂S-Durchströmungspfade im Versatz geben, so kann nicht von einem vollständigen Verbrauch des H₂S durch die Reaktion mit Fe(III) ausgegangen werden. Für dieses Szenario wird in **Variante 2** beispielhaft ein 20-prozentiger Verbrauch des H₂S durch die Reaktion mit Fe(III) des Smektitis angenommen. Demnach stehen für die Korrosion die Beiträge der primären TUF „Mikrobielle Sulfatreduktion“, „Thermochemische Sulfatreduktion“ und „Thermolabile Organika“ von jeweils 5,1 Mol, 5,1 Mol und 0,8 Mol pro 1 m³ Versatz zur Verfügung.

⁸ siehe Datenblatt „Berechnungen-Kristallin“ in der Datenbank zur detaillierten Ableitung der Beiträge der einzelnen TUF zu dieser Bilanzierungsgröße.

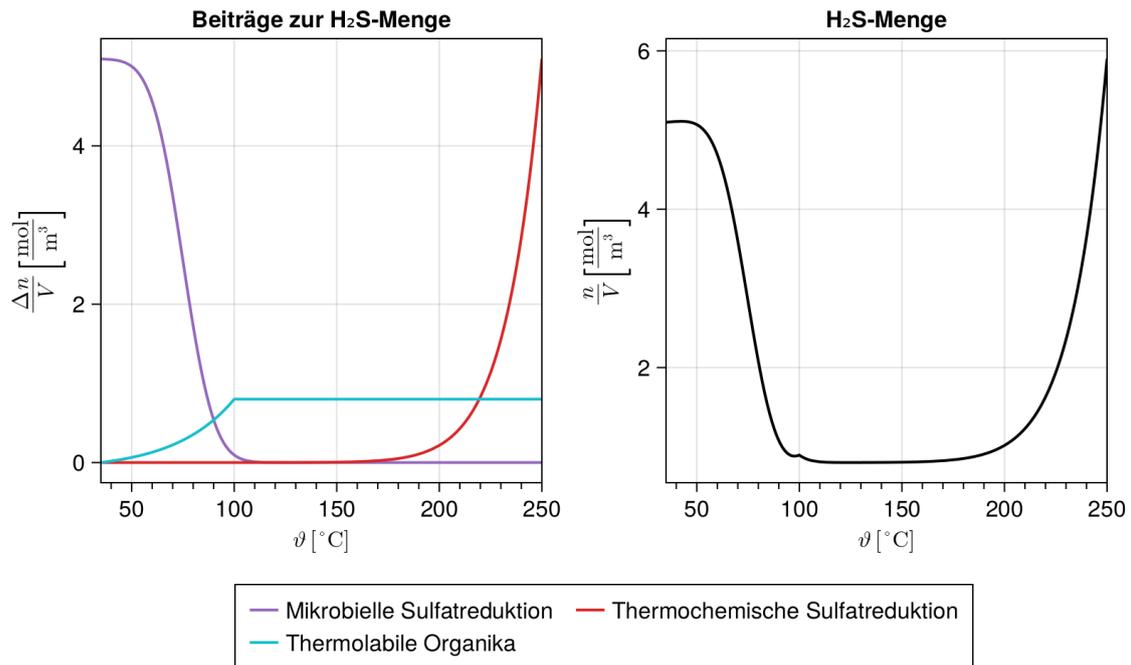


Abb. 5.11 Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur H₂S-Menge (links) und resultierende H₂S-Menge (rechts) im Versatz (Variante 2)

5.3 Abgeleitete TUF

Abgeleitete TUF werden entweder (i) direkt bzw. durch Multiplikation mit Bilanzierungsgrößen aus den primären integritätsrelevanten TUF oder (ii) durch Einsetzen in physikalische Gesetze aus den primären RN-transportrelevanten TUF, Bilanzierungsgrößen und den primären integritätsrelevanten TUF abgeleitet (Tab. 5.4). Dabei werden die primären TUF, die zwar unterschiedliche Prozesse abbilden, jedoch die gleiche Eigenschaft einer Komponente beeinflussen (z. B. die Quellfähigkeit im Ton oder die Wandstärke des Behälters), in einer abgeleiteten TUF als eine gewichtete Summe zusammengefasst (s. die nachfolgende Tabelle).

Eine kennzeichnende Eigenschaft der abgeleiteten TUF ist, dass sie zwecks Verwendung im folgenden Schritt der hier vorgestellten Methode – der Ableitung der GTUF – anschließend auf einen Wertebereich von 0 bis 1 verschoben und skaliert und als dimensionslos betrachtet werden. In dieser Abstraktion besteht eine der entscheidenden Vereinfachungen, die hier zwecks Ermittlung der Temperaturunverträglichkeit aus der komplexen Zusammenwirkung aller in der vorangehenden Priorisierung als relevant erachteter Prozesse in den untersuchten Komponenten des Nahfeldes vorgenommen

wurde. Der Wert „0“ wird bei der Temperatur angenommen, für die bezüglich des jeweiligen Prozesses die geringste Temperaturunverträglichkeit erwartet wird. Entsprechend wird der Wert 1 bei maximaler Temperaturunverträglichkeit angenommen. Daraus ergibt sich insbesondere, dass der Wertebereich [0,1] der TUF „voll ausgeschöpft“ wird, sodass ein sinnvoller Vergleich der dimensionslosen TUF möglich wird. Dieses Verfahren ist notwendig, weil bei der Addition von abgeleiteten TUF in einer GTUF die Temperaturabhängigkeiten von untereinander nicht direkt vergleichbaren Eigenschaften (z. B. die Quelfähigkeit und der Fluiddruck im Ton) erfolgt. Im Gegensatz dazu werden bei einer gewichteten Addition von primären TUF zu einer abgeleiteten TUF die Beiträge einzelner primärer TUF aufgrund der Beeinflussung der gleichen Komponenteneigenschaft anhand des Beeinflussungsgrades dieser Eigenschaft in Relation zueinander gesetzt.

Die Art der Ableitung aus primären TUF und Bilanzierungsgrößen wird in der folgenden Tabelle zusammengefasst und die resultierenden abgeleiteten TUF werden in den nachfolgenden Unterabschnitten in Abbildungen dargestellt.

Tab. 5.4 Abgeleitete TUF für das Wirtsgestein Kristallin

Abgeleitete TUF	Komponente	Art der Ableitung aus primären TUF und Bilanzierungsgrößen
Korrosion	WP.00	Gewichtete Summe „Diffusion (Lösung)“ mit Berücksichtigung der temperaturabhängigen Beiträge durch „Mikrobielle Sulfatreduktion“, „Methanogenese“ und „Fermentation“ und „H ₂ S Menge“
Quelfähigkeit	BB.01/ HR.01/ HR.02	Gewichtete Summe von „Smektit-Illitisierung“, „Quarzzementation“, „Mikrobielle Eisenreduktion“, „Mikrobielle Sulfatreduktion“, „Thermochemische Sulfatreduktion“, „H ₂ -induzierte Pyrit-Reduktion“, „Thermolabile Organika“ und „Wasserdampfeinwirkung“ (nur BB.01)
Fluiddruckänderung	BB.01/ HR.01/ HR.02	Summe von „Lösungsdruck“ und dem Produkt von „Gasdruck“, „Gasmenge“ und reziproker „Porosität“

Abgeleitete TUF	Komponente	Art der Ableitung aus primären TUF und Bilanzierungsgrößen
Advektion / Dispersion (Lösung)	BB.01/ HR.01/ HR.02	Multiplikation von Durchlässigkeitsbeiwert („Permeabilität“ * „Dichte“ / „Viskosität“) mit „Lösungsdruck“
Advektion / Dispersion (Gas)	BB.01/ HR.01/ HR.02	Multiplikation von Durchlässigkeitsbeiwert („Permeabilität“ * „Dichte“ / „Viskosität“) mit „Gasdruck“ mit „Gasmenge“
Diffusion (Lösung)	BB.01/ HR.01/ HR.02	Multiplikation von „Diffusionskoeffizient“ mit „Porosität“
Diffusion (Gas)	BB.01/ HR.01/ HR.02	Multiplikation von „Diffusionskoeffizient“ mit „Porosität“ und „Gasmenge“

Die nachfolgende Tabelle gibt eine Übersicht der Berücksichtigung der primären TUF in den bisher aufgeführten Bilanzierungsgrößen und abgeleiteten TUF.

Tab. 5.5 Beziehungen zwischen den primären TUF und den Bilanzierungsgrößen bzw. abgeleiteten TUF

Primäre TUF	Bilanzierungsgröße	abgeleitete TUF
<i>integritätsrelevante TUF</i>		
Quellen	Porosität	–
Konsolidierung	Porosität	–
Smektit-Illitisierung	Porosität	Quellfähigkeit
Wasserdampfteinwirkung	–	Quellfähigkeit
Quarzzementation	Porosität	Quellfähigkeit
Mikrobielle Eisenreduktion	Gasmenge	Quellfähigkeit
Mikrobielle Sulfatreduktion	Gasmenge, H ₂ S-Menge	Korrosion, Quellfähigkeit
Methanogenese	Gasmenge	Korrosion
Fermentation	Gasmenge	Korrosion
Karbonatzersetzung	Porosität, Gasmenge	Quellfähigkeit (Variante 1)
Mineralumwandlung	Porosität	–

Primäre TUF	Bilanzierungsgröße	abgeleitete TUF
Thermochemische Sulfat-reduktion	Gasmenge, H ₂ S-Menge	Quellfähigkeit
Lösungsdruck	–	Fluiddruckänderung, Advektion / Dispersion (Lösung)
Gasdruck	–	Fluiddruckänderung, Advektion / Dispersion (Gas)
Mechanisch induzierte H ₂ -Bildung	Gasmenge	–
Pyrolyse	Porosität, Gasmenge	–
Thermolabile Organika	Gasmenge, H ₂ S-Menge	–
CO ₂ -Desorption	Gasmenge	–
H ₂ -induzierte Pyrit-Reduktion	Gasmenge, H ₂ S-Menge	–
Karbonisierung	Porosität, Gasmenge	–
Betonkorrosion	Porosität	–
Rissbildung im Beton	Porosität	–
Korrosionsrate	–	–
Korrosionsrate durch H ₂ S	–	–
Versprödungsrate	–	–
<i>RN-transportrelevante TUF</i>		
Viskosität	–	Advektion / Dispersion (Lösung), Advektion / Dispersion (Gas)
Dichte	–	Advektion / Dispersion (Lösung)
Rückhaltung	–	–
Diffusionskoeffizient	–	Korrosion, Mikrobiell beeinflusste Korrosion,

Primäre TUF	Bilanzierungsgröße	abgeleitete TUF
		Diffusion (Lösung), Diffusion (Gas)
RN-Konzentration	–	–
Thermische Osmose	–	–

Die Entscheidung über die Notwendigkeit der Ableitung der abgeleiteten TUF aus den primären integritätsrelevanten TUF zur mikrobiellen Aktivität sowie „Gasdruck“ oder „Korrosionsrate durch H₂S“ durch Multiplikation mit Bilanzierungsgrößen „Gasmenge“ bzw. „H₂S-Menge“ begründete sich mit dem Argument, dass diese primäre TUF nur dann eine Wirkung entfalten können, wenn der bzw. das durch die entsprechende Bilanzierungsgröße abgebildete Wirkstoff bzw. -medium zur Verfügung steht. Z. B. kann eine „Gasdruckänderung“ (abgeleitete TUF) aus der „Gasdruck“-Temperaturabhängigkeit (primäre TUF) nur beim Vorliegen des Mediums Gas abgeleitet (Bilanzierungsgröße „Gasmenge“) werden.

Auch das Auftreten und die Ausprägung der durch die entsprechenden abgeleiteten TUF abgebildeten RN-Transport-Prozesse Advektion, Dispersion und Diffusion in den RN-Transport-Medien Lösung und Gas hängen von der Verfügbarkeit bzw. der Menge dieser Medien ab. Da die Lösungsmenge, wie in Kapitel 5.2 beschrieben, nicht bilanziert, sondern als temperaturunabhängig verfügbar angenommen wird, taucht keine Berücksichtigung der Lösungsmenge bei der Ableitung der entsprechenden TUF auf. Im Fall der Diffusion findet die Bilanzierungsgröße „Porosität“ Einzug in den Diffusionsterm der Transportgleichung über den effektiven Diffusionskoeffizienten, der durch die Hinzunahme der primären TUF „Diffusionskoeffizient“ abgebildet wird. Für die Advektion wird die Bilanzierungsgröße „Porosität“ indirekt berücksichtigt. Dazu wird die „Permeabilität“, die in den Durchlässigkeitsbeiwert einfließt, aus der Kozeny-Carman-Relation

$$k(\phi) \approx \frac{\phi^3}{(1-\phi)^2} \quad (5-26)$$

ermittelt.

Diese mathematische Ableitung der abgeleiteten TUF aus den primären TUF und den Bilanzierungsgrößen bildet effektiv eine Kopplung der Prozesse, die zu diesen Funktionen bzw. Größen beitragen, ab. Auf diese Weise kann bei einer konsequenten

Anwendung des vorgeschlagenen Ansatzes die Abbildung der gesamten THMCB-Prozessmatrix auf das skalare Problem der Ermittlung eines für die Verträglichkeit der Endlagerkomponenten günstigen Temperaturbereiches erwartet werden. Der zuvor erwähnte Einzug der Bilanzierungsgrößen, die sich ausschließlich aus den integritätsrelevanten primären TUF zusammensetzen, in die RN-transportrelevante abgeleitete TUF verdeutlicht die Bedeutung der gekoppelten Berücksichtigung der integritätsrelevanten Prozesse für die Ermittlung der Temperaturabhängigkeit des RN-Transportes. Die Ableitung der abgeleiteten TUF „Korrosion“ unten stellt hingegen eine in diesem Ansatz bisher nicht beobachtete Einflussnahme der Transportprozesse (von nicht-radioaktiven Stoffen) auf integritätsrelevante abgeleitete TUF dar. Dieses Ergebnis unterstreicht denn auch die Notwendigkeit einer sorgfältigen Berücksichtigung im Arbeitsschritt „Priorisierung“ dieses Ansatzes nicht nur der integritätsrelevanten Prozesse, sondern auch der transportrelevanten Prozesse.

5.3.1 Korrosion

Die Korrosion der äußeren Kupferschicht des Behälters bei niedrigen anzunehmenden Chlorid-Konzentrationen im Grundwasser einer Kristallinregion in Deutschland erfolgt ausschließlich entsprechend der Reaktion $2\text{Cu(s)} + \text{H}_2\text{S} + \text{H}^+ \rightleftharpoons \text{Cu}_2\text{S(s)} + \text{H}_2\text{(g)}$ /WER 92/. Diese Reaktion wird durch den diffusiven Transport des H_2S zur Behälteroberfläche gesteuert /WER 92/, /KIN 17/. Es kann für diese Reaktion außerdem angenommen werden, dass sie ähnlich wie die Korrosionsreaktion des Eisens bei dem Ablauf in einem porösen Medium wie Ton durch den langsameren als die Korrosionsreaktion selbst diffusiven Abtransport ihres Produktes bestimmt wird. Die theoretische Grundlage für den Einfluss des diffusiven Abtransportes des Fe^{2+} durch das poröse Medium, in welches das korrodierende Metall eingebettet ist, wurde in der Arbeit /STE 19/ präsentiert. Diese Arbeit zeigt, dass aufgrund der Abhängigkeit des reversiblen Potentials der Korrosionsreaktion $\text{Fe} \rightarrow \text{Fe}^{2+} + 2\text{e}^-$ von der Fe^{2+} -Konzentration in der an Metall angrenzenden Porenlösung, die Rate der Korrosionsreaktion unterhalb eines bestimmten Schwellenwerts der Porosität, der z. B. für zementbasierte Materialien bei 18,5 % liegt /STE 19/, durch den langsameren diffusiven Abtransport des Fe^{2+} deutlich reduziert wird. Oberhalb dieses Schwellenwertes verläuft die Korrosionsreaktion zunehmend wie in einer Lösung.

Für die Ableitung der abgeleiteten TUF „Korrosion“ wird daher nicht die primäre TUF „Korrosionsrate durch H_2S “ (Gleichung (19)), sondern die abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ verwendet. Die Korrosion durch H_2S setzt die temperaturabhängige Verfügbarkeit

des H_2S voraus. Daher wird die abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ mit der temperaturabhängigen Bilanzierungsgröße „ H_2S -Menge“ multipliziert.

Für die bei der Bilanzierungsgröße „ H_2S -Menge“ eingeführte Variante 1 sind die Beiträge der beiden TUF aufgrund der für die Korrosion nicht verfügbaren H_2S -Menge gleich Null, so dass keine abgeleitete TUF „Korrosion“ aufgestellt werden kann. Die folgende Abbildung zeigt daher nur die für die Variante 2 aufgestellte abgeleitete TUF „Korrosion“.

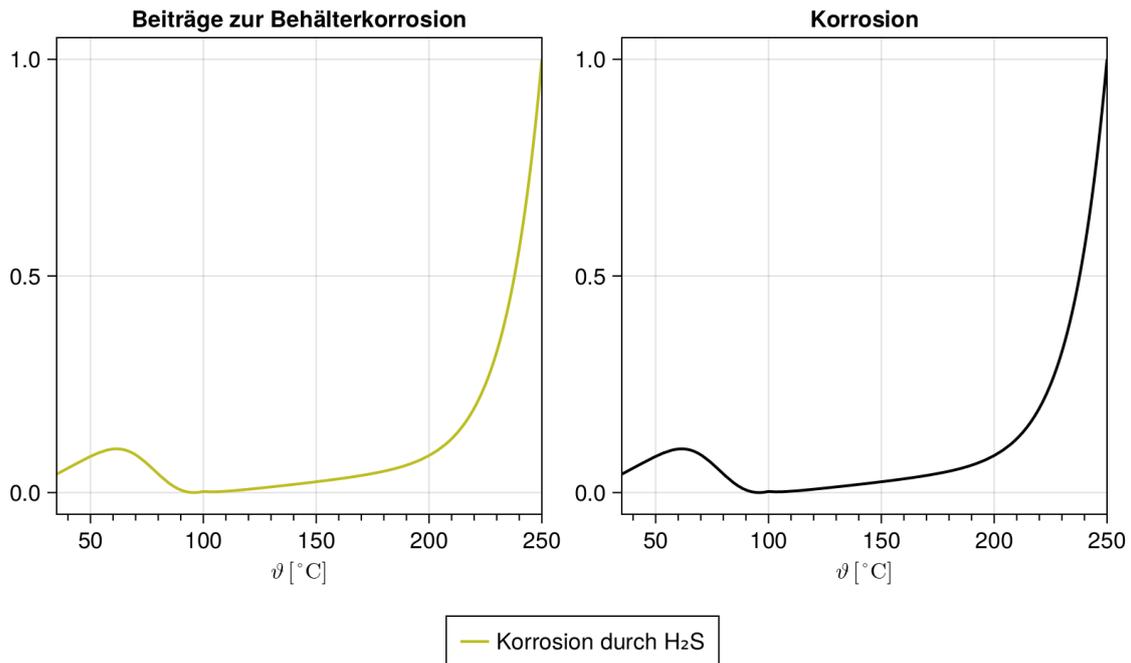


Abb. 5.12 Abgeleitete TUF „Korrosion“ (Variante 2)

5.3.2 Quellfähigkeit

Die abgeleitete TUF „Quellfähigkeit“ ergibt sich als gewichtete Summe aller primären TUF, die die Quellfähigkeit tonhaltiger Materialien beeinflussen. Eine Zusammenfassung zu dieser abgeleiteten TUF erfolgte aufgrund der Beeinflussung der gleichen Eigenschaft des Versatzes. Dadurch kann die Gewichtung der einwirkenden Prozesse direkt auf das Merkmal „Quellfähigkeit“ abgestimmt werden. Die Gewichte entsprechen für die beitragenden primären TUF „Mikrobielle Sulfatreduktion“, „Thermochemische Sulfatreduktion“ und „Thermolabile Organika“ den maximalen Beiträgen dieser TUF zur Bilanzierungsgröße „ H_2S -Menge“ (Abb. 5.13). Dies begründet sich darin, dass H_2S , wie zu dieser Bilanzierungsgröße oben diskutiert wurde, eine Reaktion mit Fe(III) in der oktaedrischen Schicht der Mineralstruktur der quellfähigen Minerale eingehen und dadurch ihre Quellfähigkeit verringern kann. Um diese Prozesse in Relation zu den Prozessen,

die durch die beitragenden primären TUF „Smektit-Illitisierung“, „Quarzzementation“ und „Wasserdampfeinwirkung“ abgebildet werden, zu setzen, werden die Gewichte für die letzteren drei TUF gleich gesetzt und in erster Näherung als Menge Fe(III) in der oktaedrischen Schicht der Mineralstruktur der quellfähigen Minerale (bezogen auf 1 m³ Versatz wie auch bei der Bilanzierungsgröße „H₂S-Menge“) abgeleitet. Dies begründet sich darin, dass bei der Smektit-Illitisierung die oktaedrischen Schichten der Smektite durch Substitutionen Fe(III) verlieren, so dass die oktaedrischen Kationen der entstehenden Illite in einem erheblich größerem Ausmaß durch Al(III) vertreten sind. In diesem Sinne stellt die Menge Fe(III) in der oktaedrischen Schicht der Mineralstruktur ein Merkmal für die Quellfähigkeit des Tons dar und kann zur Gewichtung des durch die primäre TUF „Smektit-Illitisierung“ abgebildeten Prozesses herangezogen werden. Der durch die primäre TUF „Quarzzementation“ abgebildete Prozess resultiert aus der Smektit-Illitisierungsreaktion und wird daher mit der gleichen Gewichtung versehen. Der durch die primäre TUF „Wasserdampfeinwirkung“ abgebildete Prozess hängt mit dem Gehalt an Smektiten zusammen und wird aus diesem Grund ebenfalls mit der Menge Fe(III) in der oktaedrischen Schicht der Mineralstruktur gewichtet. Diese Menge beträgt für den Calcigel-Bentonit 4480 Mol.⁹

⁹ S. Datenblatt „Berechnungen-Kristallin“ in der Datenbank zur detaillierten Ableitung der Gewichte. Aufgrund der Geringfügigkeit der Koeffizienten bei den primären TUF Thermochemische Sulfatreduktion und Mikrobielle Sulfatreduktion wird auf die Darstellung unterschiedlicher Varianten verzichtet. Es wird daher nur eine Darstellung im Bericht gegeben

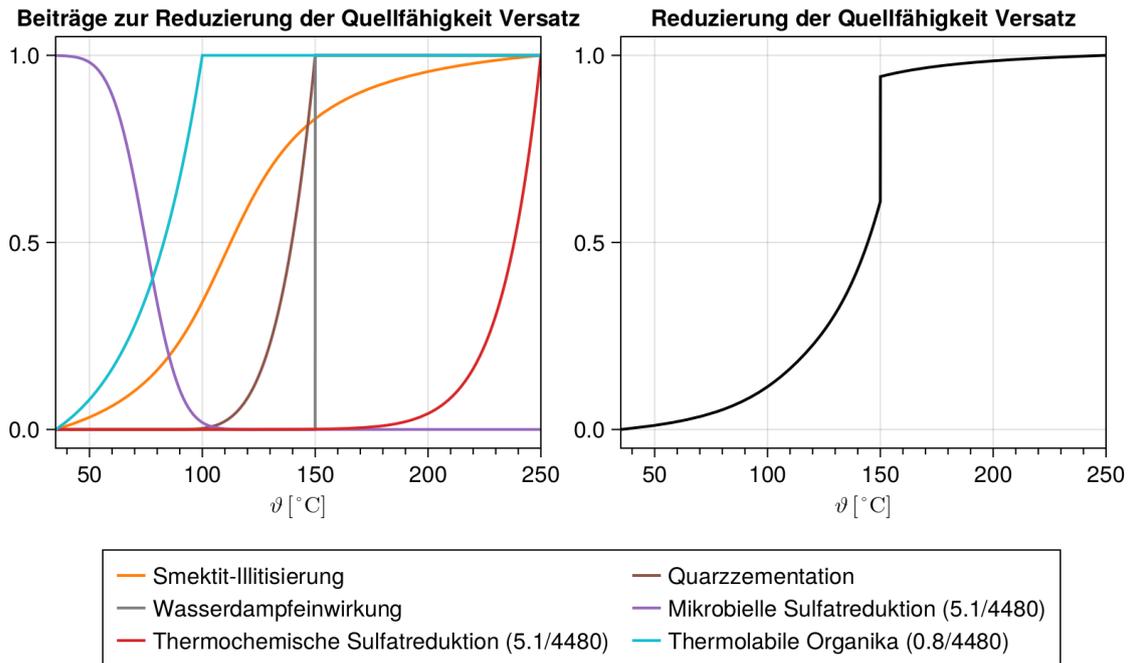


Abb. 5.13 Abgeleitete TUF „Quellfähigkeit“ im Versatz

5.3.3 Fluiddruckänderung

Die abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ stellt die Beeinflussung des Lösungs- und Gasdruckes im Endlagersystem durch temperaturbedingte Druckänderung sowie aufgrund der Porositätsänderung, bei der das Korngerüst auf die Porenfluide positiven oder negativen Druck ausübt, dar. Die Druckänderung der Lösung wird direkt durch die primäre TUF „Lösungsdruck“ (Gleichung (12)) dargestellt. Die Gasdruckänderung wird als Produkt der Bilanzierungsgröße „Gasmenge“, der reziproken Bilanzierungsgröße „Porosität“ sowie der primären TUF „Gasdruck“ (Gleichung (13)) bestimmt. Die abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ ergibt sich im Versatz als Summe von Lösungs- und Gasdruckänderungen (Abb. 5.14).

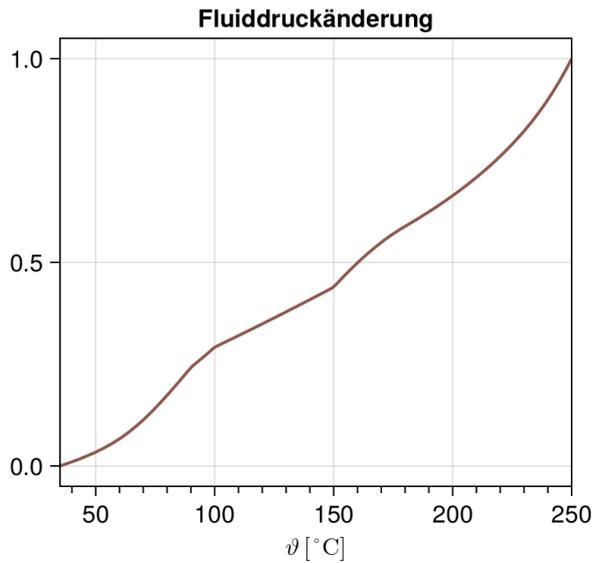


Abb. 5.14 Abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ im Versatz

5.3.4 Advektion / Dispersion (Lösung)

Zur Ableitung der TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ werden entsprechend dem Advektionsterm in der Transportgleichung die primären TUF „Dichte“ (Gleichung (23)) und „Lösungsdruck“ (Gleichung (12)) mit der aus der Bilanzierungsgröße „Porosität“ nach Gleichung (26) abgeleiteten „Permeabilität“ multipliziert und durch die primäre TUF „Viskosität“ (Gleichungen (20) und (21)) dividiert. Aus der Porositätsbilanz für die Komponente Versatz (Abb. 5.9) ergibt sich die abgeleitete TUF in Abb. 5.15.

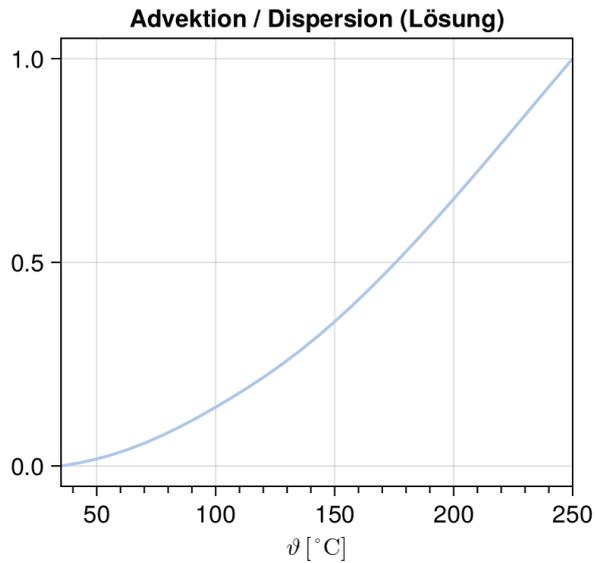


Abb. 5.15 Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ im Versatz

5.3.5 Advektion / Dispersion (Gas)

Zur Ableitung der TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ wird entsprechend dem Konvektionsterm in der Transportgleichung die Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ mit der primären TUF „Gasdruck“ (Gleichung (13)) sowie der aus der Bilanzierungsgröße „Porosität“ nach Gleichung (26) abgeleiteten „Permeabilität“ multipliziert und durch die primäre TUF „Viskosität“ (Gleichung (22)) dividiert. Aus der Porositätsbilanz für die Komponente Versatz (Abb. 5.9) ergibt sich die abgeleitete TUF in Abb. 5.16.

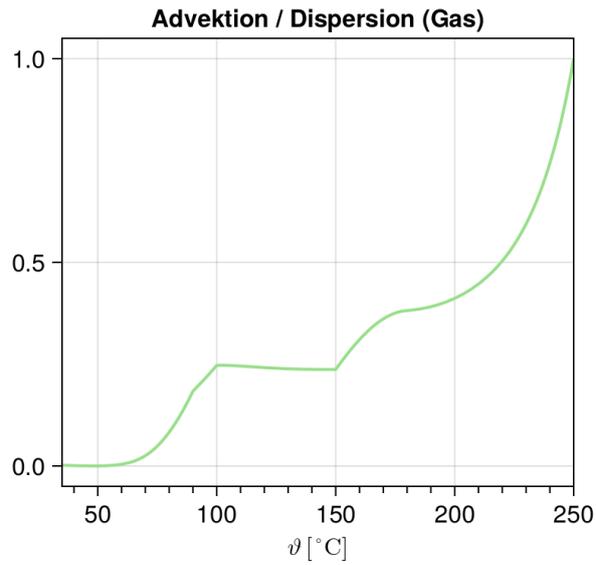


Abb. 5.16 Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ im Versatz

5.3.6 Diffusion (Lösung)

Die abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ ergibt sich aus dem Diffusionsterm der Transportgleichung als Produkt aus der Bilanzierungsgröße „Porosität“ und der primären TUF „Diffusionskoeffizient“ (Gleichung (24)). Aus der Porositätsbilanz für die Komponente Versatz (Abb. 5.9) ergibt sich die abgeleitete TUF in Abb. 5.17.

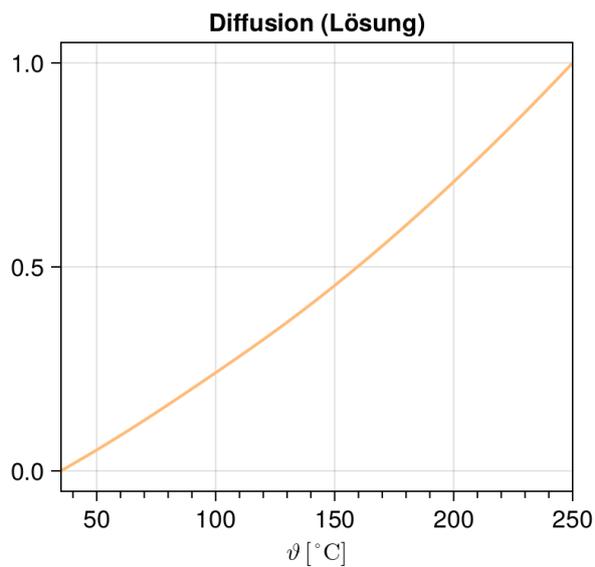


Abb. 5.17 Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ im Versatz

5.3.7 Diffusion (Gas)

Die abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ ergibt sich aus dem Diffusionsterm der Transportgleichung als Produkt aus den Bilanzierungsgrößen „Porosität“ und „Gasmenge“ sowie der primären TUF „Diffusionskoeffizient“ (Gleichung (25)). Aus der Porositätsbilanz für die Komponente Versatz (Abb. 5.9) ergibt sich die abgeleitete TUF in Abb. 5.18.

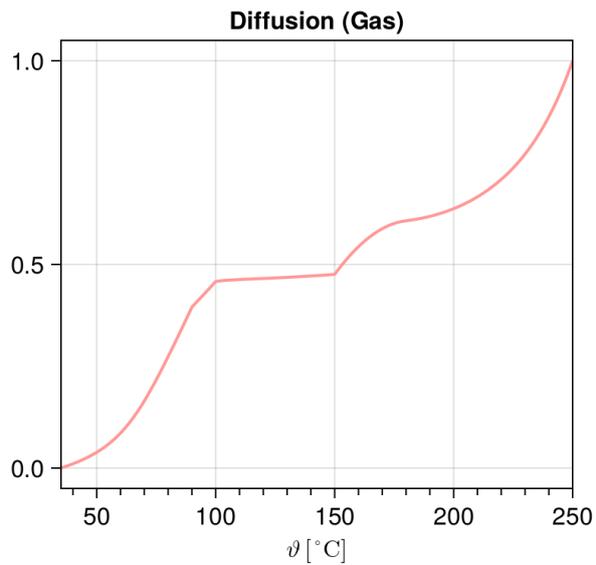


Abb. 5.18 Abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ im Versatz

6 Ableitung der GTUF

Die abgeleiteten TUF, die im vorangehenden Arbeitsschritt hergeleitet wurden, werden in einer gewichteten Summe komponentenweise zusammengeführt. Die komponentenweise Zusammenführung, im Unterschied zu einer denkbaren Zusammenführung der abgeleiteten TUF für das gesamte betrachtete System, ist damit begründet, dass die Auswahl der beteiligten TUF und die Ausprägung der Bilanzierungsgrößen im vorliegenden Ansatz wie oben beschrieben komponentenscharf aufgelöst wurden. Eine feinere Auflösung ist bei Bedarf und einer entsprechenden Kenntnislage möglich. Die damit erhaltenen GTUF für einzelne Komponenten können wiederum verbal-argumentativ zur Ableitung des günstigen Temperaturbereichs für das Gesamtsystem zusammengeführt werden. Diese Arbeitsschritte werden im Folgenden detailliert beschrieben.

6.1 Wichtung

Die Wichtung der abgeleiteten TUF beim komponentenweisen Aufsummieren bietet die Möglichkeit an, den Beitrag einzelner abgeleiteter TUF bzw. der mit diesen TUF abgebildeten Prozesse durch eine höhere Wichtung herauszustellen oder durch eine niedrigere Wichtung zu relativieren. Insofern ist die Wichtung ein Werkzeug, welches die Ergebnisse der Analyse erheblich beeinflussen kann. Das gilt aber auch für den Fall, dass TUF gleichgewichtet werden. Dementsprechend bedarf es immer einer systematischen Ausarbeitung und sorgfältig begründeter Anwendung der TUF. Eine Vergabe der Wichtungen anhand der Expertenmeinungen ist ebenfalls sorgfältig zu dokumentieren, da diese vom beteiligten Expertenkreis abhängen und damit eine subjektive Verzerrung der Ergebnisse zur Folge haben kann. Deshalb sollte über den Einsatz von Expertenmeinungen hinaus eine systematische Ausarbeitung der Vergabe der Wichtungen für GTUF aus den folgenden Teilbewertungen bestehen:

- (1) Zum einen soll die Qualität der Daten oder der Untersuchungen, die zur Herleitung einzelner primärer TUF oder Bilanzierungsgrößen verwendet wurden, qualitativ bewertet werden. Z. B. sollen die durch mehrfache und/oder In-situ-Messungen erhaltenen Daten höher bewertet werden als Ergebnisse der Einzelmessungen, die in anderen Studien nicht reproduziert wurden, oder der Laborversuche, die ggf. eine unzureichende Übertragbarkeit der Versuchsbedingungen auf endlagerrelevante Bedingungen oder des Versuchsmaßstabs auf den Endlagerkomponentenmaßstab aufweisen können. Dadurch soll insbesondere der Einfluss von möglichen

Ausreißern oder nicht-repräsentativen Untersuchungen zumindest nicht überbewertet und ggf. minimiert werden.

Die Bewertung der Modellierungsergebnisse soll die Qualität der für die Herleitung der Modellparameter verwendeten Annahmen, Datenbasen und Stoffgesetze u. A. auf ähnliche Weise wie vorangehend beschrieben berücksichtigen. Unsere Erfahrung zeigt, dass z. B. für Salzgrus vorhandene temperaturabhängige Stoffgesetze mitunter auf einer sehr dünnen Datenbasis und mit sehr vereinfachenden Annahmen entwickelt wurden. Diese Ergebnisse sollen auf keinen Fall allein dadurch für die Verwendung im vorliegenden Ansatz disqualifiziert werden, weil die Komplexität der modellierten Vorgänge und die Qualität der Datenbasis und nicht des Modellwerkzeuges dabei sicherlich eine entscheidende Rolle spielt. Dennoch sollte eine dünne Datenbasis oder nicht-repräsentative Annahmen nicht aufgrund einer hohen Qualität der Simulationen bei der Vergabe der Wichtungen überbewertet werden.

- (2) Zum anderen wurden einige primäre bzw. abgeleitete TUF im vorliegenden Ansatz teilweise oder vollständig basierend auf der Expertenmeinung wie oben bei der Bewertung der primären TUF zusammengefasst (Tab. 5.2) hergeleitet. Folgendes Beispiel kann die dabei möglichen Fallstricke verdeutlichen. Für thermochemische Sulfatreduktion ist bekannt, dass sie bei Temperaturen oberhalb von 120 °C stattfindet /CAI 22/. Die ausschließliche Verwendung einer Expertenmeinung könnte zur Folge haben, dass die funktionelle Beschreibung der primären TUF „Thermochemische Sulfatreduktion“ durch einen mehr oder weniger scharfen Anstieg ab 120 °C gekennzeichnet wäre. Die Verwendung von gemessenen und anhand des Arrhenius-Gesetzes extrapolierten Werten der Raten dieser Reaktion /TRU 14/ im vorliegenden Ansatz resultiert allerdings in einem kaum wahrnehmbaren Anstieg der TUF ab 120 °C, der erst ab ca. 180 °C einen steilen Charakter zeigt. Daher sollte aus unserer Sicht eine systematische Ableitung der Wichtungen eine Überbewertung oder ggf. Höherbewertung der zu einem erheblichen Maße durch Expertenmeinungen hergeleiteten TUF verhindern können.

Da diese Argumentation im Allgemeinen auf den Grad des Vertrauens zu den experimentellen oder modelltheoretischen Bestimmungen des wahren Wertes einer Messgröße anhand der beobachteten Messwerte eingeht, bietet sich die Anwendung der Bayes-Statistik an, in der per Definition die Wahrscheinlichkeit $P(A)$ unter Berücksichtigung aller verfügbaren Informationen den Grad des Vertrauens darin ausdrückt, dass A auftreten wird, bevor das Experiment ausgeführt wird /MIC 99/. Diese Methode bekam wie in /MIC 99/ dargestellt den Einzug in die DIN-Normung für Kernstrahlungs-

messungen und sollte hinsichtlich der Anwendbarkeit bei der Vergabe der Wichtungen geprüft werden.

Des Weiteren zeigte eine vorläufige, auszugsweise durchgeführte Analyse der Kopplungen zwischen den in unterschiedlichen Komponenten des Endlagersystems ablaufenden assoziierten Prozessen, dass einige assoziierte Prozesse eine deutlich erhöhte Häufigkeit der kopplungsbedingten Beeinflussung von Prozessen in anderen Komponenten aufweisen. Diese Häufigkeit kann aus unserer Sicht, im Fall der Weiterentwicklung und erfolgreichen Verwendung der Kopplungsanalyse, herangezogen werden, um neben den vorangehend angesprochenen qualitativen Bewertungen auch eine semi-quantitative Teilbewertung der Vergabe der Wichtungen vorzunehmen. Im Anbetracht dieser Argumentation wurde im vorliegenden Ansatz von der Vergabe der Wichtungen bisher nur sehr eingeschränkt Gebrauch gemacht. Es wurden alle abgeleiteten TUF grundsätzlich mit einer Wichtung 1 versehen.

6.2 Ableitung der GTUF für einzelne Komponenten

Die Ableitung der GTUF erfolgt durch eine komponentenweise Addition von für jeweilige Komponenten identifizierten und wie vorangehend beschrieben aufbereiteten und gewichteten abgeleiteten TUF. Die erhaltene gewichtete Summe wird, nachdem sie – wie auch die abgeleiteten TUF – auf einen Wertebereich von 0 bis 1 verschoben und skaliert, zu einer GTUF. Eine GTUF hat dementsprechend zumindest einen Punkt mit einem Wert „0“ (ein GTUF-Minimum). Im vorliegenden Ansatz wird für die einzelnen Komponenten ein günstiger Temperaturbereich gesucht, um die im nächsten Abschnitt beschriebene Ableitung des günstigen Temperaturbereichs für das gesamte ELS durch eine evtl. Überschneidung der Temperaturbereiche für einzelne Komponenten zu erleichtern. Diese Temperaturbereiche werden durch die Temperatur(en) eingegrenzt, bei denen (der) die GTUF einen Wert von 0,05 annimmt. Dieser Wert wurde willkürlich festgelegt und entspricht dem auch sonst in der Statistik häufig benutzten Level von 5 %. Falls die GTUF stetig zu niedrigen oder hohen Temperaturen abfällt, wird sie den Wert 0,05 nur bei einer Temperatur annehmen, die jeweils die rechte oder die linke Grenze des gesuchten Temperaturbereiches ist. Die Gebirgstemperatur bzw. die 250 °C ergibt dann die andere Grenze des gesuchten Temperaturbereiches. Die folgenden Abbildungen stellen dieses Verfahren am Beispiel der integritätsrelevanten GTUF für alle betrachteten ELS-Komponenten dar. Es ist anzumerken, dass für die Integrität des Behälters nur eine abgeleitete TUF, die unterschiedliche Korrosionsprozesse vereint (flächige und lokale

Korrosion), verwendet wurde. Für den Prozess der Versprödung konnte mangels mathematischer Beschreibung seiner Temperaturabhängigkeit keine abgeleitete TUF aufgestellt werden. Sollte die Temperaturabhängigkeit der lokalen Korrosionsprozesse (z. B. Lochfraß) anders als bei der Priorisierung angenommen nicht durch die Temperaturabhängigkeit der primären TUF „Korrosionsrate“ (bzw. der abgeleiteten TUF „Diffusion (Lösung)“) abgedeckt sein und der Einfluss auf eine weitere Eigenschaft des Behälters – Perforationsgrad – untersucht werden, so müsste für die Integrität des Behälters eine weitere abgeleitete TUF, die lokale Korrosionsprozesse abbildet, ergänzt werden.

Für die Komponenten Behälter und Versatz werden im Folgenden die integritätsrelevanten abgeleiteten TUF sowie die resultierende GTUF aufgeführt (Abb. 6.1, Abb. 6.2). Dabei werden zwei Varianten unterschieden. In der **Variante 1** wird der vollständige Verbrauch von H_2S im Bentonitversatz angenommen, wodurch kein H_2S für die Korrosion des Behälters verfügbar ist und damit keine GTUF für den Behälter ausgewiesen werden kann. In **Variante 2** wird H_2S nur teilweise im Bentonitversatz verbraucht, wodurch eine relevante Menge an H_2S für die Korrosion des Behälters verfügbar ist, sodass sich eine GTUF für den Behälter ergibt. Für den Versatz ergibt sich aus den beiden Varianten keine unterschiedliche Bewertung.

Ferner sind im Folgenden die RN-Transportrelevanten abgeleiteten TUF sowie die resultierende GTUF für den Versatz aufgeführt, die eine Hilfestellung bei der Bestimmung eines günstigen Temperaturbereiches leisten können (Abb. 6.3).

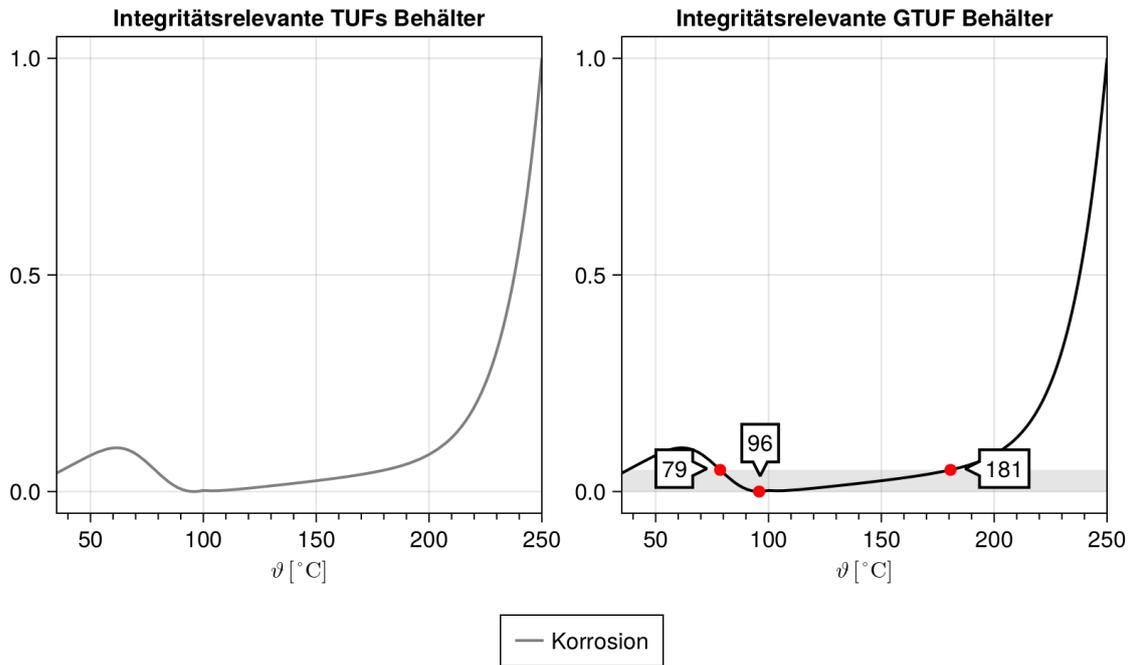


Abb. 6.1 Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Behälter (rechts) Variante 2

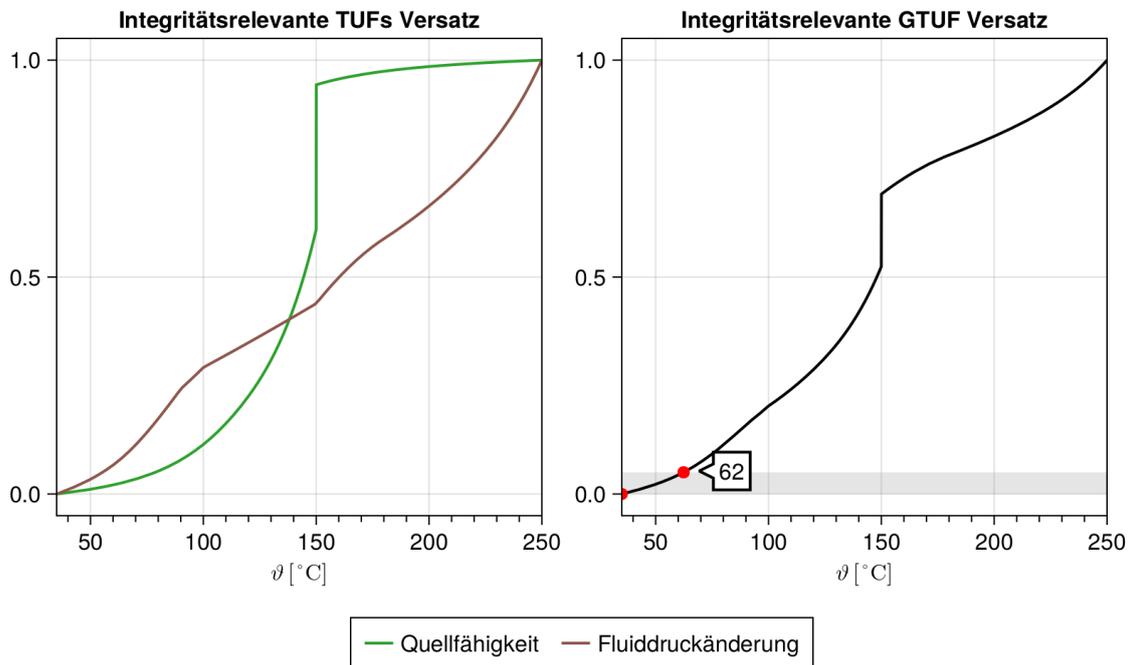


Abb. 6.2 Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Versatz (rechts)

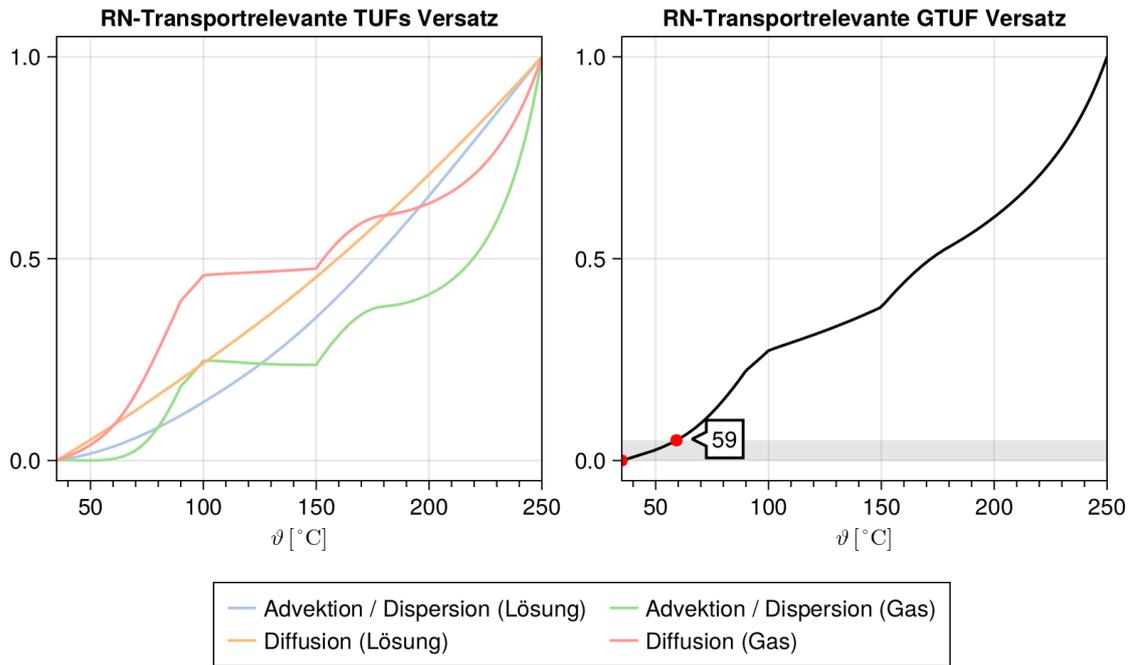


Abb. 6.3 Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für den Versatz (rechts)

7 Ableitung des günstigen Temperaturbereichs für das Gesamtsystem

Mit den Ergebnissen aus der Relevanzprüfung und der Priorisierung steht ein Satz an relevanten Prozessen für alle temperaturbeeinflussten Komponenten zur Verfügung, mit deren Hilfe man die günstigen Temperaturen und letztlich auch die Festlegung einer Grenztemperatur für ein ELS diskutieren kann. Für die Diskussion steht mit den TUF zu den relevanten Prozessen und den daraus abgeleiteten GTUF ein mathematisches Hilfsmittel zur Verfügung, um eine getroffene Entscheidung nachvollziehbar zu begründen.

Die Festlegung des günstigen Temperaturbereiches erfolgt verbal-argumentativ unmittelbar aus den Ergebnissen der GTUF. Der Integrität der Barrieren wird dabei die entscheidende Bedeutung beigemessen, da die Integrität der am sicheren Einschluss beteiligten Komponenten die Grundvoraussetzung für einen sicheren Einschluss ist. Ist diese gegeben, sind die Einflüsse auf den Transport sekundär. Aus den GTUF zur Integrität wird somit ein Temperaturbereich abgeleitet, der als günstig angesehen wird. Ist dieser Bereich zu groß, kann eine weitere Eingrenzung durch Hinzunahme der GTUF zum Radionuklidtransport vorgenommen werden. Führt die Hinzunahme der GTUF zum Radionuklidtransport zu keiner ausreichenden Eingrenzung, können darüber hinaus auch andere Argumente in die Diskussion eingebracht werden, insbesondere Fragen zur Betriebssicherheit oder zum Sicherheitskonzept.

7.1 Temperaturverträglichkeit mit den beschriebenen Prämissen

Die in Kap. 6 abgeleiteten Temperaturverträglichkeiten für die betrachteten Komponenten sind in Tab. 7.1 zusammengefasst.

Tab. 7.1 Günstige Temperaturbereiche für die Integrität der Komponenten im Wirtsgestein Kristallin (Variante 1**)

Komponente	Günstiger Temperaturbereich		
	Untere Grenze	Minimum GTUF	Obere Grenze*
Behälter	–	–	–
Versatz	< GBT	< GBT	60

* die Werte werden gerundet

**s. Unterkapitel 5.4.2 und 6.2. Wesentliches Unterscheidungsmerkmal der Variante 1 ist der vollständige Verbrauch von H₂S im Bentonitversatz, wodurch kein H₂S für die Korrosion des Behälters verfügbar ist.

Tab. 7.2 Günstige Temperaturbereiche für die Integrität der Komponenten im Wirtsgestein Kristallin (Variante 2^{**})

Komponente	Günstiger Temperaturbereich		
	Untere Grenze*	Minimum GTUF	Obere Grenze*
Behälter	80	96	180
Versatz	< GBT	< GBT	60

* die Werte werden gerundet

**s. Unterkapitel 5.4.2 und 6.2. Wesentliches Unterscheidungsmerkmal der Variante 2 ist der nur teilweise Verbrauch von H₂S im Bentonitversatz, wodurch eine relevante Menge an H₂S für die Korrosion des Behälters verfügbar ist.

Für die **Variante 1** wird die Erkenntnis gewonnen, dass für das ELS im Kristallingestein eine von der Gebirgstemperatur möglichst gering abweichende Temperatur die höchste Temperaturverträglichkeit gewährleistet. Eine größere Abweichung von der Gebirgstemperatur würde demnach eine größere Abweichung von der besten Temperaturverträglichkeit mit sich bringen.

Die Übersicht zeigt, dass für die **Variante 2** im Kristallingestein bei der Temperatur von 80 °C bis 180 °C für die Komponente Behälter eine günstige Temperatur vorliegt, d. h. dieser Temperaturbereich ist prinzipiell als günstig einzuordnen. Da für die Komponente Versatz eine von der Gebirgstemperatur möglichst gering abweichende Temperatur die beste Temperaturverträglichkeit gewährleistet, wird der untere Temperaturbereich als günstig für das gesamte Endlagersystem angesehen, d. h. eine Temperatur 100 °C mit einer Bandbreite von 80 °C bis 120 °C. Ein Heranziehen der günstigen Temperaturbereiche hinsichtlich des Transports von Radionukliden zur weiteren Eingrenzung ist nicht erforderlich.

Generell ist eine der Voraussetzungen des Optimierungsverfahrens mit Hilfe von TUF das Vorhandensein eines lokalen Minimums innerhalb des betrachteten Temperaturintervalls (und nicht am Rand) zu erreichen. Wenn ein solches Minimum gefunden wird, kann ein günstiger Temperaturbereich um das Minimum (z.B. mithilfe des in diesem Bericht dargestellten 5%-Kriteriums) angegeben werden, um der Größe des Anstieges in der Nähe des Minimums Rechnung zu tragen¹⁰. Liegt das Minimum jedoch (wie in

¹⁰ Ein steiler Anstieg in der Umgebung des Minimums führt zu einem schmalen günstigen Temperaturbereich. Ein flacher Verlauf der TUF in der Nähe des Minimums ergibt einen breiten günstigen Temperaturbereich.

Variante 1 und 2) am linken Rand des betrachteten Temperaturintervalls und verlaufen die GTUF monoton steigend, so kann aus diesem Verfahren keine günstige Temperatur abgeleitet werden. Vielmehr ist in diesem Fall eine (obere) Grenztemperatur zu ermitteln, die sich aus der niedrigsten Temperatur ergibt, bei der ein unbedingt zu vermeidender Prozess abläuft. Die Festlegung eines solchen Prozesses und dessen niedrigster ungünstiger Temperatur muss dann auch unter Berücksichtigung anderer Aspekte (bspw. Flächenbedarf und Teufe des Einlagerungsbereichs) erfolgen, basiert also nicht allein auf der Temperaturverträglichkeit und geht daher über den Rahmen dieser Arbeit hinaus.

7.2 Ausblick und weitere Arbeiten

Der Vergleich der Ergebnisse für diese zwei Varianten stellt insbesondere die Bedeutung der Quantifizierung der verfügbaren H₂S-Menge heraus. Bilanzierende Modellierungen zur Verfügbarkeit von H₂S – unter Berücksichtigung der Durchströmung von Bentonit – anstelle der hier vorgenommenen Bilanzierungsschätzung können die Aussagequalität des Ansatzes verbessern. Zudem sollte untersucht werden, welche Auswirkungen evtl. Unterschiede in der verwendeten Grenztemperatur in dem angegebenen Bereich für die Ermittlung von Standortregionen durch die rvSU haben.

Die Quantifizierung der Beiträge der beteiligten Prozesse zur Temperaturunverträglichkeit mittels einer Bilanzierung, wie sie in den Varianten implementiert wurde, stellt die konsequente Umsetzung des in diesem Bericht entwickelten Ansatzes dar. Allerdings, wie vorangehend thematisiert, setzt ihre Verwendung eine Bilanzierung entsprechend den jeweiligen Standortverhältnissen voraus.

Literatur

- /ALC 17/ Alcolea, A., Kuhlmann, U., Marschall, P., Lisjak, A., Grasselli, G., Mahabadi, O., de la Vaissière, R., Leung, H., Shao, H.: A pragmatic approach to abstract the excavation damaged zone around tunnels of a geological radioactive waste repository: application to the HG-A experiment in Mont Terri. Geological Society, London, Special Publications, 443(1), 127-147, 2017.
- /ALT 16/ Alt, S., Kallenbach-Herbert, B., Ustohalova, V.: Bewertung der Einführung einer wirtsgesteinsunabhängigen Grenztemperatur unter Vorsorgeaspekten -Rev. 02, Darmstadt, 2016.
- /AME 01/ Amend, J. P., Shock, E. L.: Energetics of overall metabolic reactions of thermophilic and hyperthermophilic Archaea and Bacteria, FEMS Microbiology Reviews, 25, 175-243, 2001. DOI: 10.1111/j.1574-6976.2001.tb00576.x.
- /AVS 05/ Avsar, E., Ulusay, R. & Erguler, Z. A.: Swelling properties of Ankara (Turkey) clay with carbonate concretions. Environmental & Engineering Geoscience, 11(1), 73-93, 2005.
- /BER 21/ Bertrams, N., Herold, P., Leonhard, J., Marggraf, U., Seidel, D., Wunderlich, A.: TREND - Weiterentwicklung der Konzepte der Transport- und Einlagerungstechnik von Endlagerbehältern, BGE TEC 2021-01, Peine, 2021.
- /BGE 22/ Bundesgesellschaft für Endlagerung: Methodenbeschreibung zur Durchführung der repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen gemäß Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung, Peine, 2022.
- /BRA 19/ Bracke, G., Hartwig-Thurat, E., Larue, J., Meleshyn, A., Weyand, T.: Untersuchungen zu den „maximalen physikalisch möglichen Temperaturen“ gemäß § 27 StandAG im Hinblick auf die Grenztemperatur an der Außenfläche von Abfallbehältern. Bericht GRS-A-3948. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, 2019.

- /BRU 12/ Bruggeman, C., Craen, M. de: Boom Clay natural organic matter. Studiecentrum voor Kernenergie Centre D'Etude De L'Energie Nucleaire (SCK-CEN): Mol, Juni 2012.
- /BUN 20/ Deutscher Bundestag: Verordnung des Bundesministeriums für Umwelt, Natur-schutz und nukleare Sicherheit: Verordnung über Sicherheitsanforderungen und vor-läufige Sicherheitsuntersuchungen für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle, Deutscher Bundestag, Drucksache 19/19291 vom 18.05.2020.
- /BUS 16/ Busch, A., Bertier, P., Gensterblum, Y., Rother, G., Spiers, C. J., Zhang, M., Wentinck, H. M.: On sorption and swelling of CO₂ in clays. *Geomechanics and Geophysics for Geo-Energy and Geo-Resources*, Bd. 2, Nr. 2, S. 111–130, DOI 10.1007/s40948-016-0024-4, 2016.
- /CAI 22/ Cai, C., Li, H., Li, K., Wang, D.: Thermochemical sulfate reduction in sedimentary basins and beyond: A review. *Chemical Geology*, 121018, 2022.
- /CHA 70/ Chapman, S., Cowling, T.G.: *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (3rd ed.), Cambridge University Press, 1970.
- /CHE 13/ Chen, C., Park, D. W., Ahn, W. S.: Surface modification of a low cost bentonite for post-combustion CO₂ capture. *Applied Surface Science*, 283, 699-704, 2013.
- /COU 85/ Couture, R. A.: Steam rapidly reduces the swelling capacity of bentonite. *Nature*, Bd. 318, S. 50–52, 1985. DOI : 10.1038/318050a0
- /COU 98/ Coudrain-Ribstein, A., Gouze, P., Marsily, G. de : Temperature-carbon dioxide partial pressure trends in confined aquifers. *Chemical Geology*, Bd. 145, 1-2, S. 73–89, 1998. DOI: 10.1016/S0009-2541(97)00161-7
- /CUE 01/ Cuevas, J., Garralón, A., Ramírez, S., Leguey, S.: Hydrothermal alteration of a saponitic bentonite, Mineral reactivity and evolution of surface properties. *Clay Minerals*, Bd. 36, Nr. 01, S. 61–74, 2001. DOI: 10.1180/000985501547358

- /CZA 24a/ Czaikowski, O., Förster, B., Hinze, M., Mayer, K.-M., Meleshyn, A., Middelhoﬀ, M., Rübeler, A., Wieczorek, K., Wolf, J.: Ableitung der wirtsgesteins-spezifischen Temperaturverträglichkeit von Endlagerkomponente – Wirtsgestein Tongestein. Bericht GRS-754. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2024.
- /CZA 24b/ Czaikowski, O., Förster, B., Hinze, M., Mayer, K.-M., Meleshyn, A., Middelhoﬀ, M., Rübeler, A., Wieczorek, K., Wolf, J.: Ableitung der wirtsgesteins-spezifischen Temperaturverträglichkeit von Endlagerkomponente – Wirtsgestein Steinsalz. Bericht GRS-756. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2024.
- /DIE 88/ Diercks, D. R., Hull, A. B., Kassner, T. F.: Analysis of corrosion data for carbon steels in simulated salt repository brines and acid chloride solutions at high temperatures. in Joint US/FRG Technical Exchange Workshop, Albuquerque, NM, March 8-10, 1988.
- /EIN 05/ Einstein, A.: Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. Ann. Phys., 322: 549-560.
<https://doi.org/10.1002/andp.19053220806>, 1905.
- /ELI 08/ Elie, M., & Mazurek, M.: Biomarker transformations as constraints for the depositional environment and for maximum temperatures during burial of Opalinus Clay and Posidonia Shale in northern Switzerland. Applied Geochemistry, 23(12), 3337-3354, 2008.
- /ESK 22/ Entsorgungskommission: Stellungnahme der Entsorgungskommission zum 100 Grad Celsius Kriterium in § 27 (4) des Standortauswahlgesetzes. Stellungnahme der Entsorgungskommission (ESK) vom 12.05.2022.
- /FER 03/ Fernández-Prini, R., Alvarez, J. L., & Harvey, A. H. (2003). Henry's constants and vapor-liquid distribution constants for gaseous solutes in H₂O and D₂O at high temperatures. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 32(2), 903-916.

- /FRE 20/ Freeze, G., Sevougian, S. D., Kuhlman, K., Gross, M., Wolf, J., Buhmann, D., Bartol, J., Leigh, C., Mönig, J.: Generic FEPs Catalogue and Salt Knowledge Archive. SANDIA REPORT SAND2020-13186, 2020.
- /GAO 17/ Gao, S., Jin, P., Brown, B., Young, D., Nešić, S., Singer, M.: Effect of high temperature on the aqueous H₂S corrosion of mild steel. *Corrosion*, 73(10), 1188-1191, 2017.
- /GEN 13/ Gens, A.: On the hydromechanical behaviour of argillaceous hard soils-weak rocks. In *Proceedings of the 15th European Conference on Soil Mechanics and Geotechnical Engineering–Geotechnics of Hard Soils–Weak Rocks (Part 4)*. A. Anagnostopoulos et al. (Eds.). IOS Press (pp. 71-118), 2013.
- /GEV 81/ Gevantman, L.H. (Ed.): *Physical Properties Data for Rock Salt*, NBS Monograph 167, U.S. Department of Commerce / National Bureau of Standards, Washington D.C., January 1981.
- /GOM 21/ Gómez Romera, J.J.: *jgomera/iapws: (v1.5.2)*. Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.4744318>, 2021.
- /GOU 16/ Gouly, N. R., Sargent, C., Andras, P., & Aplin, A. C. : Compaction of diagenetically altered mudstones–Part 1: Mechanical and chemical contributions. *Marine and Petroleum Geology*, 77, 703-713, 2016.
- /HER 20/ Herold, P., Gruner, M, Jobmann, M, Kudla, W, Müller, C.: *Teilbericht zum Arbeitspaket 1 - Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse im Ton- und Salzgestein*. ELSA Phase 2. BGE TEC 2020-11. BGE TECHNOLOGY GmbH, Technische Universität Bergakademie Freiberg - Institut für Bergbau und Spezialtiefbau. Peine, 2020.
- /HEU 14/ Heuser, M., Weber, C., Stanjek, H., Chen, H., Jordan, G., Schmahl, W. W., Natzeck, C.: The interaction between bentonite and water vapor. I, Examination of physical and chemical properties. *Clays and Clay Minerals*, Bd. 62, Nr. 3, S. 188–202, 2014. DOI: 10.1346/CCMN.2014.0620303

- /HÖK 05/ Hökmark, H., Claesson, J.: Use of an analytical solution for calculating temperatures in repository host rock. *Engineering geology*, 81(3), 353-364, 2005.
- /HUC 21/ Hucheng, D., Meiyan, F., Wen, Z., Liying, Z., Xinhui, X., Yilin, L., & Dailun, W.: The pores evolution of lacustrine shale induced by smectite-to-illite conversion and hydrocarbon generation: upper Triassic Yanchang Formation, Ordos Basin, China. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 202, 108460, 2021.
- /JAH 13/ Jahn S, Sönke J.: Endlagerstandortmodell Nord Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis. Projekt ANSICHT: Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein. Hannover: BGR; 2013.
- /JAH 16/ Jahn S, Mrugalla S, Stark L.: Endlagerstandortmodell SÜD Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis. Projekt ANSICHT: Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein. Hannover: BGR; 2016.
- /JOB 07/ Jobmann, M., Polster, M.: The response of Opalinus clay due to heating, A combined analysis of in situ measurements, laboratory investigations and numerical calculations. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, Bd. 32, 8-14, S. 929–936, 2007. DOI: 10.1016/j.pce.2006.03.014
- /JOB 15/ Jobmann, M., Lommerzheim, A.: Endlagerkonzept sowie Verfüll- und Verschlusskonzept für das Endlagerstandortmodell SÜD. ANSICHT. TEC-26-2015-TB. DBE TECHNOLOGY GmbH. Peine, 2015.
- /JOB 16/ Jobmann, M., Burlaka, V., Meleshyn, A., Rübel. A.: Projekt ANSICHT. Spezifische Prozessanalysen. Arbeitsbericht TEC-13-2016-B, 2016.
- /JOB 21/ Jobmann, M., Burlaka, V.: CHRISTA-II. Verfüll- und Verschlusskonzepte für Endlager im Kristallingestein in Deutschland, BGE TEC 2021-15, Peine, 2021.

- /JOC 81/ Jockwer, N.: Untersuchungen zu Art und Menge des im Steinsalz des Zechsteins enthaltenen Wassers sowie dessen Freisetzung und Migration im Temperaturfeld endgelagerter radioaktiver Abfälle. Disseratation, 134 S., Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, Technische Universität Clausthal: Clausthal, 15. Juni 1981.
- /KAR 06/ Karnland, O., Birgersson, M.: Montmorillonite stability. With special respect to KBS-3 conditions, SKB TR-06-11, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2006.
- /KAS 03/ Kashefi, K., Lovley, D. R.: Extending the upper temperature limit for life. *Science* 301, 934, 2003.
- /KAS 08/ Kashefi, K., Shelobolina, E. S., Elliott, W. C., Lovley, D. R.: Growth of thermophilic and hyperthermophilic Fe (III)-reducing microorganisms on a ferruginous smectite as the sole electron acceptor. *Applied and Environmental Microbiology* 74, 251–258, 2008.
- /KAU 08/ Kaufhold, S., Dohrmann, R., Koch, D., Houben, G.: The pH of aqueous bentonite suspensions. *Clays and Clay Minerals*, 56(3), 338-343, 2008.
- /KAU 12/ Kaufhold, S., Hein, M., Dohrmann, R., Ufer, K.: Quantification of the mineralogical composition of clays using FTIR spectroscopy. *Vibrational Spectroscopy*, 59, 29-39, 2012.
- /KAU 13/ Kaufhold, A., Gräsle, W., Plischke, I., Dohrmann, R., Siegesmund, S.: Influence of carbonate content and micro fabrics on the failure strength of the sandy facies of the Opalinus Clay from Mont Terri (Underground Rock Laboratory). *Engineering geology*, 156, 111-118, 2013.
- /KAU 23/ Kaufhold, S., Dohrmann, R., Wallis, I., Weber, C.: Chemical and mineralogical reactions of bentonites in geotechnical barriers at elevated temperatures—review of experimental evidence and modelling progress. *Clay Minerals*, 1-43, 2023.

- /KIN 17/ King, F., Chen, J., Qin, Z., Shoesmith, D., Lilja, C.: Sulphide-transport control of the corrosion of copper canisters. *Corrosion Engineering, Science and Technology*, 52(sup1), 210-216, 2017.
- /KLI 09/ Klinkenberg, M., Kaufhold, S., Dohrmann, R., Siegesmund, S.: Influence of carbonate microfabrics on the failure strength of claystones. *Engineering Geology*, 107(1-2), 42-54, 2009.
- /KNE 21/ Kneuker, T., Furche, M.: Capturing the structural and compositional variability of Opalinus Clay: constraints from multidisciplinary investigations of Mont Terri drill cores (Switzerland). *Environmental Earth Sciences*, 80(11), 421, 2021.
- /KNE 23/ Kneuker, T., Dohrmann, R., Ufer, K., Jaeggi, D.: Compositional-structural characterization of the Opalinus Clay and Passwang Formation: New insights from Rietveld refinement (Mont Terri URL, Switzerland). *Applied Clay Science*, 242, 107017, 2023.
- /KOM 16/ Abschlussbericht der Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe. Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe Berlin, K-Drs. 268, 5. Juli 2016.
- /KOZ 27/ Kozeny, J.: Über kapillare Leitung des Wassers im Boden (Aufstieg, Versickerung und Anwendung auf die Bewässerung). *Sitzungsber. Akad. Wiss., Wien*, 136(2a): 271-306, 1927.
- /KUH 13/ Kuhlman, K. L., Malama, B.: Brine flow in heated geologic salt (No. SAND2013-1944). Sandia National Lab. (SNL-NM), Albuquerque, NM (United States), 2013.
- /MA 22/ Ma, J., Pekala, M., Alt-Epping, P., Pastina, B., Maanoja, S., Wersin, P. (2022). 3D modelling of long-term sulfide corrosion of copper canisters in a spent nuclear fuel repository. *Applied geochemistry*, 146, 105439.

- /MAR 18/ Marschall, P., Giger, S., De La Vassière, R., Shao, H., Leung, H., Nussbaum, C., Trick, T., Lanyon, B., Senger, R., Lisjak, A., Alcolea, A.: Hydro-mechanical evolution of the EDZ as transport path for radionuclides and gas: insights from the Mont Terri rock laboratory (Switzerland). Mont Terri Rock Laboratory, 20 Years: Two Decades of Research and Experimentation on Claystones for Geological Disposal of Radioactive Waste, 175-196, 2018.
- /MEL 23/ Meleshyn, A., Hinze, M., Middelhoff, M., Jantschik, K.: Thermische Integrität von Ton und Tonsteinen. Experiment und gekoppelte THMC-Simulationen (THMC-Sim), Technical Report in preparation, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2023.
- /MIC 99/ Michel, R., Kirchhoff, K.: Nachweis-, Erkennungs- und Vertrauensgrenzen bei Kernstrahlungsmessungen. TÜV-Verlag, 1999.
- /MON 11/ Monfared, M., Sulem, J., Delage, P., Mohajerani, M.: A laboratory investigation on thermal properties of the Opalinus claystone. Rock Mechanics and Rock Engineering, 44(6), 735-747, 2011.
- /NEA 00/ Nuclear Energy Agency: Features, Events and Processes (FEPs) for Geologic Disposal of Radioactive Waste, An International Database. Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD) NEA, Paris, France, 2000.
- /NEA 19/ NEA: International Features, Events and Processes (IFEP) List for the Deep Geological Disposal of Radioactive Waste, Version 3.0, NEA/RWM/R(2019)1, 2019.
- /OH 03/ Oh, E. E., van Ginkel, S., Logan, B. E.: The relative effectiveness of pH control and heat treatment for enhancing biohydrogen gas production. Environmental Science and Technology 37, 5186–5190, 2003.
- /OSC 89/ Oscarson, D. W., Dixon, D. A.: The effect of steam on montmorillonite. Applied Clay Science, Bd. 4, Nr. 3, S. 279–292, DOI 10.1016/0169-1317(89)90035-5, 1989.

- /OUH 10/ Ouhadi, V. R., Yong, R. N., Goodarzi, A. R., Safari-Zanjani, M.: Effect of temperature on the re-structuring of the microstructure and geo-environmental behaviour of smectite. *Applied Clay Science*, Bd. 47, S. 2–9, DOI 10.1016/j.clay.2008.08.008, 2010.
- /PAR 19/ Parkes, R. J., Berlendis, S., Roussel, E. G., Bahruji, H., Webster, G., Oldroyd, A., Weightman, A.J., Bowker, M., Davies, P.R., Sass, H.: Rock-crushing derived hydrogen directly supports a methanogenic community: significance for the deep biosphere. *Environmental microbiology reports*, 11(2), 165-172, 2019. DOI: 10.1111/1758-2229.12723.
- /PED 17/ Pedersen, K., Bengtsson, A., Blom, A., Johansson, L., Taborowski, T.: Mobility and reactivity of sulphide in bentonite clays—implications for engineered bentonite barriers in geological repositories for radioactive wastes. *Applied Clay Science*, 146, 495-502, 2017.
- /PEK 19/ Pekala, M., Wersin, P., Cloet, V., Diomidis, N.: Reactive transport calculations to evaluate sulphide fluxes in the near-field of a SF/HLW repository in the Opalinus Clay. *Applied geochemistry*, 100, 169-180, 2019.
- /PHI 81/ Phillips, S.L., Igbene, A., Fair, J.A., Ozbek, H., Tavana, M.: A technical databook for geothermal energy utilization. Lawrence Berkeley Laboratory University of California Berkeley, LBL-12810, Juni 1981.
- /PUI 01/ Puigdomenech, I., Ambrosi, J. P., Eisenlohr, L., Lartigue, J. E., Banwart, S. A., Bateman, K., Milodowski, A. E., West, J. M., Griffaut, L., Gustafsson, E., Hama, K. Yoshida, H., Kotelnikova, S., Pedersen, K., Michaud, V., Trotignon, L., Rivas Perez, J., Tullborg, E. L.: O₂ depletion in granitic media. The Rex project (No. SKB-TR--01-05). Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co, 2001.
- /QI 14/ Qi, Y., Luo, H., Zheng, S., Chen, C., Lv, Z., Xiong, M.: Effect of temperature on the corrosion behavior of carbon steel in hydrogen sulphide environments. *International Journal of Electrochemical Science*, 9(4), 2101-2112, 2014.

- /ROT 86/ Rothfuchs, T.: Untersuchung der thermisch induzierten Wasserfreisetzung aus polyhalitischem Steinsalz unter in situ Bedingungen, Temperaturversuch 5 im Salzbergwerk Asse. Kommission der Europäischen Gemeinschaften (KEG), Kernforschung und -technologie, EUR 10392 DE, 85 S.: Luxemburg, 1986.
- /RUT 14/ Rutqvist, J., Zheng, L., Chen, F., Liu, H. H., Birkholzer, J.: Modeling of coupled thermo-hydro-mechanical processes with links to geochemistry associated with bentonite-backfilled repository tunnels in clay formations. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 47, 167-186, 2014.
- /SAL 14/ Salas, J., Sena, C., & Arcos, D. (2014). Hydrogeochemical evolution of the bentonite buffer in a KBS-3 repository for radioactive waste. Reactive transport modelling of the LOT A2 experiment. *Applied Clay Science*, 101, 521-532.
- /SCH 19/ Schlegel, M. L., Martin, F., Fenart, M., Blanc, C., Varlet, J., Foy, E., Prêt, D., Trcera, N.: Corrosion at the carbon steel-clay compact interface at 90° C: Insight into short-and long-term corrosion aspects. *Corrosion Science*, 152, 31-44, 2019.
- /SCH 21/ Schlegel, M. L., Martin, F., Fenart, M., Blanc, C., Varlet, J., Foy, E.: Corrosion of carbon steel in clay compact environments at 90 C: Effect of confined conditions. *Corrosion Science*, 184, 109368, 2021.
- /SEN 08/ Senger, R., Marschall, P., Finsterle, S.: Investigation of two-phase flow phenomena associated with corrosion in an SF/HLW repository in Opalinus Clay, Switzerland. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 33, S317-S326, 2008.
- /SIR 15/ Siren, T., Kantia, P., Rinne, M.: Considerations and observations of stress-induced and construction-induced excavation damage zone in crystalline rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 73, 165-174, 2015.
- /SKB 19/ SKB: Supplementary information on canister integrity issues, SKB TR-19-15, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 2019.

- /STE 19/ Stefanoni, M., Angst, U. M., Elsener, B.: Kinetics of electrochemical dissolution of metals in porous media. *Nature Materials*, 18(9), 942-947, 2019.
- /STO 22/ Stone, J., Edgar, J.O., Gould, J.A., Telling, J.: Tectonically-driven oxidant production in the hot biosphere. *Nat Commun* 13, 4529, 2022. DOI: 10.1038/s41467-022-32129-y
- /ŠUC 93/ Šucha, V.: Smectite to Illite Conversion in Bentonites and Shales of the East Slovak Basin. *Clay Minerals*, Bd. 28, Nr. 2, S. 243–253, 1993. DOI: 10.1180/claymin.1993.028.2.06
- /SUL 02/ Sultan, N., Delage, P., Cui, Y.: Temperature effects on the volume change behaviour of Boom clay. *Engineering Geology*, Bd. 64, S. 135–145, 2002. DOI: 10.1016/S0013-7952(01)00143-0
- /TAK 08/ Takai, K., Nakamura, K., Toki, T., Tsunogai, U., Miyazaki, M., Miyazaki, J., Hirayama, H., Nakagawa, S., Nunoura, T., Horikoshi, K.: Cell proliferation at 122 C and isotopically heavy CH₄ production by a hyperthermophilic methanogen under high-pressure cultivation. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 105(31), 10949-10954, 2008. DOI: 10.1073/pnas.0712334105
- /THA 77/ Thauer, R. K.; Jungermann, K.; Decker, K.: Energy conservation in chemotrophic anaerobic bacteria. *Bacteriological Reviews* 41, 100–180, 1977.
- /THY 11/ Thyberg, B., Jahren, J.: Quartz cementation in mudstones, Sheet-like quartz cement from clay mineral reactions during burial. *Petroleum Geoscience*, Bd. 17, Nr. 1, S. 53–63, DOI 10.1144/1354-079310-028, 2011.
- /TRU 13/ Truche, L., Jodin-Caumon, M.-C., Lerouge, C., Berger, G., Mosser-Ruck, R., Giffaut, E., Michau, N.: Sulphide mineral reactions in clay-rich rock induced by high hydrogen pressure. Application to disturbed or natural settings up to 250°C and 30 bar H₂, *Chemical Geology*, 2013. DOI: 10.1016/j.chemgeo.2013.05.025

- /TRU 14/ Truche, L., Bazarkina, E. F., Barré, G., Thomassot, E., Berger, G., Dubessy, J., Robert, P.: The role of S⁻³ ion in thermochemical sulphate reduction: geological and geochemical implications. *Earth and Planetary Science Letters*, 396, 190-200, 2014.
- /UFE 08/ Ufer, K., Stanjek, H., Roth, G., Dohrmann, R., Kleeberg, R., Kaufhold, S.: Quantitative phase analysis of bentonites by the Rietveld method. *Clays and Clay Minerals*, 56(2), 272-282, 2008.
- /VIL 16/ Vilarrasa, V., Rutqvist, J., Blanco Martin, L., Birkholzer, J.: Use of a dual-structure constitutive model for predicting the long-term behavior of an expansive clay buffer in a nuclear waste repository. *International Journal of Geomechanics*, 16(6), D4015005, 2016.
- /VOL 04/ Volckaert, G., Bernier, F., Sillen, X., Van Geet, M., Mayor, J. C., Göbel, I., Blümling, P., Frieg, B. Su, F.: Similarities and differences in the behaviour of plastic and indurated clays. In 6th European Commission Conference on the Management and Disposal of Radioactive Waste (Euradwaste'04), Community Policy and Research & Training Activities (pp. 281-291), 2004.
- /VUL 08/ Vulin, D., Kurevija, T., Golub, M.: Enhanced Geothermal Systems-The Usage of CO₂ as Heat Transmission Fluid. *Energy and The Environment*, 247-258, 2008.
- /WAG 02/ Wagner, W., Pruss, A.: The IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 31, 387-535, 2002.
- /WER 92/ Werme, L., Sellin, P., Kjellbert, N.: Copper canisters for nuclear high level waste disposal. Corrosion aspects. SKB-TR-92-26, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 1992.
- /YES 17/ Yeste, M. P., Gatica, J. M., Ahrouch, M., Vidal, H.: Clay honeycomb monoliths as low cost CO₂ adsorbents. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, Bd. 80, S. 415-423, 2017. DOI: 10.1016/j.jtice.2017.07.031

/YVO 14/ Yvon-Durocher, G., Allen, A. P., Bastviken, D., Conrad, R., Gudas, C., St-Pierre, A., Thanh-Duc, N., Del Giorgio, P. A.: Methane fluxes show consistent temperature dependence across microbial to ecosystem scales. *Nature*, 507(7493), 488-491, 2014. DOI: 10.1038/nature13164

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Brennstabkokille mit Kupferhülle, beladen mit 3 CSD-V /JOB 21/	8
Abb. 2.2	Querschnittsprofil eines Einlagerungsbohrloch mit Ausbau und Gebinde mit bestrahlten Brennelementen für die Bohrlocheinlagerung wärmeentwickelnder Abfälle /JOB 21/	9
Abb. 2.3	Allgemeine FEP-Matrix für ein Endlager für radioaktive Abfälle /FRE 20/	11
Abb. 3.1	Ablauf der Relevanzprüfung und Priorisierung	16
Abb. 3.2	Komponenten und einwirkende Prozesse in einem Endlagersystem /FRE 20/.....	17
Abb. 3.3	Zeitliche Entwicklung der Temperatur an der Behälteroberfläche und an der Grenzfläche zwischen dem Versatz und dem Wirtsgestein in Kristallinformation (Auslegungstemperatur 100 °C) /KAR 06/	17
Abb. 5.1	Temperaturabhängiger Porositätsverlauf errechnet aus den in /MEL 23/ experimentell bestimmten Permeabilitäten für B25	38
Abb. 5.2	Smektit-Anteil der Smektit-Illit-Wechsellagerung einer Bentonit-Formation bzw. eines Tongesteins in Abhängigkeit von der Temperatur /ŠUC 93/.....	39
Abb. 5.3	TUF zur mikrobiellen Aktivität	41
Abb. 5.4	Temperaturabhängigkeit des CO ₂ -Partialdrucks in Sedimentformationen nach /COU 98/	43
Abb. 5.5	Temperaturabhängigkeit der CO ₂ -Produktion durch Kerogenpyrolyse nach /BRU 12/	46
Abb. 5.6	Temperaturabhängigkeit der CO ₂ -Desorption nach /YES 17/.....	48
Abb. 5.7	Modellhafte Entwicklung der Porosität in einem Bentonitversatz in einem Endlager im Opalinuston /VIL 16/.....	57
Abb. 5.8	Änderung des Porenvolumens mit dem Illit-Anteil in der Illit-Smektit-Wechsellagerung in einem Tongestein /HUC 21/.....	57
Abb. 5.9	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) im Versatz	59
Abb. 5.10	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Gasmenge (links) und resultierende Gasmenge im Versatz (rechts).....	62

Abb. 5.11	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur H ₂ S-Menge (links) und resultierende H ₂ S-Menge (rechts) im Versatz (Variante 2).....	64
Abb. 5.12	Abgeleitete TUF „Korrosion“ (Variante 2).....	70
Abb. 5.13	Abgeleitete TUF „Quellfähigkeit“ im Versatz	72
Abb. 5.14	Abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ im Versatz.....	73
Abb. 5.15	Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ im Versatz.....	74
Abb. 5.16	Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ im Versatz.....	75
Abb. 5.17	Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ im Versatz	75
Abb. 5.18	Abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ im Versatz	76
Abb. 6.1	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Behälter (rechts) Variante 2	81
Abb. 6.2	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Versatz (rechts)	81
Abb. 6.3	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für den Versatz (rechts)	82

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Temperaturbeeinflusste Komponenten und deren Bezeichnungen in /FRE 20/ für Kristallingestein	18
Tab. 5.1	Primäre TUF für das Wirtsgestein Kristallgestein	29
Tab. 5.2	Bewertung der primären TUF für das Wirtsgestein Kristallin	53
Tab. 5.3	Identifizierte Bilanzierungsgrößen mit den beitragenden primären TUF	56
Tab. 5.4	Abgeleitete TUF für das Wirtsgestein Kristallin	65
Tab. 5.5	Beziehungen zwischen den primären TUF und den Bilanzierungsgrößen bzw. abgeleiteten TUF	66
Tab. 7.1	Günstige Temperaturbereiche für die Integrität der Komponenten im Wirtsgestein Kristallin (Variante 1**)	83
Tab. 7.2	Günstige Temperaturbereiche für die Integrität der Komponenten im Wirtsgestein Kristallin (Variante 2**)	84

Abkürzungsverzeichnis

ALZ	Auflockerungszone
BE	Brennelemente
BGE	Bundesgesellschaft für Endlagerung
BGR	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe
BSK-RCu	Rückholbare Brennstab-Kokille mit Kupfermantel
CSD-V	Kokille mit verglasten wärmeentwickelnden Abfällen aus der Wiederaufarbeitung
DWR	Druckwasserreaktor
ELS	Endlagersystem
ELK	Endlagerkonzept
ESK	Entsorgungskommission
EndISiAnfV	Endlagersicherheitsanforderungsverordnung
EndISiUntV	Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung
ewG	Einschlusswirksamer Gebirgsbereich
FEP	Features, Events and Processes
GBT	Gebirgstemperatur
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH
GTUF	Gesamttemperaturunverträglichkeitsfunktion
IFEP	Internationalen FEP-Liste der OECD/NEA
mKBS-3	Modifiziertes KBS-3-Konzept (Kernbränslesicherheit, nuclear fuel Safety)
RN	Radionuklid
StandAG	Standortauswahlgesetz
THMCB	Thermisch, hydraulisch, mechanisch, chemisch, biologisch
TUF	Temperaturunverträglichkeitsfunktion

**Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH**

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

85748 Garching b. München

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de