

**AKB-Tagungsband
des Workshops**

**Zementbasierte
Verschlussbauwerke
im Salinar**

**Braunschweig,
5.-7. September 2023**



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH

AKB-Tagungsband des Workshops

Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar

**Braunschweig,
5.-7. September 2023**

zusammengestellt:
Thorsten Meyer

Mai 2024

Anmerkung:

Dieser Tagungsband wurde von der GRS in Zusammenarbeit mit den Autoren und den Mitgliedern des Arbeitskreises Integrität zementbasierter Verschlussbauwerke im Salinar (AKB) erarbeitet.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Der Band gibt die Auffassung und Meinung der Autoren wieder.

**GRS - 765
ISBN 978-3-910548-57-2**

Deskriptoren

Abdichtungselement, Baustoffentwicklung, Baustoffintegrität, Geotechnische Barriere, Korrosion, Langzeitsicherheitsanalyse, Langzeitstabilität, Nachweiskonzept, Salzbeton, Sorelbeton, THEREDA, THM/THC-Modellierung, THMC-Prozesse, Verschlussbauwerk

Inhaltsverzeichnis

	Vorwort.....	V
	Einführung	VII
	Einleitung	VIII
	Resümee	XX
	Workshop Programm	XXI
1	Tagungsbeiträge – Fachpublikationen.....	1
1.1	H.-J. Engelhardt ¹ , M. Heidmann-Ruhz ² , L. von Borstel ¹ , H. Räuschel ¹ , F. Rempel ² und A. Carstensen ² : Strategie zur Entwicklung von Baustoffen	1
1.2	F. Rempel ¹ , A. Carstensen ¹ , M. Heidmann-Ruhz ¹ , K. Herchen ¹ , E. Karsten ¹ , V. Krase ¹ , L. von Borstel ² , H.-J. Engelhardt ² , T. Fischer ² , C. Lerch ² , H. Räuschel ² und M. Polster ² : Übersicht über Baustoffuntersuchungen für Stilllegungsverfahren am Beispiel des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM)	8
1.3	H.-J. Engelhardt ¹ , R. Wendling ¹ , F. Rempel ² , A. Carstensen ² , M. Heidmann-Ruhz ² , L. von Borstel ¹ und H. Räuschel ¹ : Qualitätssicherung von Baustoffen.....	16
1.4	F. Häusler und D. Freyer: Löslichkeitsverhalten von C-S-H-Phasen in NaCl-gesättigten Lösungen vs. THEREDA (Stand Cemdata18).....	27
1.5	G.D. Miron ¹ , B. Lothenbach ² , and D.A. Kulik ¹ : Thermodynamic Modeling of cementitious systems: Cemdata18, CemGEMS, ongoing C-(A)-S-H model development, and integration with THEREDA	35

1.6	I. Paschke, D. Freyer: Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil 1 - Baustoffrezeptur- typen und deren Eigenschaften	58
1.7	M. Pannach, I. Paschke und D. Freyer: Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil 2 - Thermodynamische Berechnung der Beständigkeit im Wirtsgestein Salz (Stand THEREDA)	68
1.8	U. Düsterloh: Geotechnische Anforderungen an Verschlussbauwerke im Salinar	79
1.9	D. Naumann ¹ , T. Popp ² : Wie messe ich was - mechanische Versuche zur Charakterisierung von Verschlussbaustoffen	95
1.10	E Jahns ¹ und T. Popp ² : Hydraulische Versuchstechniken zur Charakterisierung von Verschlussbaustoffen	108
1.11	A.-W. Gutsch ¹ , E. Rigo ² , H. Alberts ² : Untersuchungsmethoden zur Charakterisierung von mineralischen Verschlussbaustoffen	121
1.12	W. Gräsle: Langzeitversuche - Kriechverhalten von M4-Salzbeton aus dem ERAM	135
1.13	N. Müller-Hoeppe ¹ : Zusammenfassung der Erfahrungen aus dem Barrierebau mit abbindenden Baustoffen – „Lessons Learnt“	162
1.14	M. Gruner ¹ und T. Popp ² : Großtechnische Versuche – Wissensstand zu den Materialeigen- schaften Zement- und MgO-basierter Verschlussbaustoffe	190
1.15	F. Schmidt-Döhl: THC-Modellierung von zementbasierten Abdichtmaterialien und Verschlussbauwerken	205

1.16	M. Polster ¹ , C. Lerch ¹ , A. Carstensen ² , M. Heydorn ² , M. Herklotz ¹ , A. Hussein ¹ , N. Müller-Hoeppe ¹ , T. Schröpfer ² und A. Weis ² : Numerische Umsetzung des Abbindeverhaltens erhärtender Baustoffe	221
1.17	J. Wolf ¹ , M. Niemeyer ² und J. Kindlein ³ : Bedeutung der geotechnischen Barrieren im Safety Case: Sicherheitskonzepte und die Darstellung des sicheren Einschlusses im einschlusswirksamen Gebirgsbereich	240
2	Tagungsbeiträge – Foliensätze	253
2.1	H.-J. Engelhardt, M. Heidmann-Ruhz, L. von Borstel, H. Räuschel, F. Rempel und A. Carstensen: Strategie zur Entwicklung von Baustoffen	253
2.2	F. Rempel und A. Carstensen: Übersicht über Baustoffuntersuchungen für Stilllegungsverfahren am Beispiel des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM)	279
2.3	H.-J. Engelhardt, R. Wendling, F. Rempel, A. Carstensen, M. Heidmann-Ruhz, L. von Borstel und H. Räuschel: Qualitätssicherung von Baustoffen	298
2.4	F. Häusler und D. Freyer: Löslichkeitsverhalten von C-S-H-Phasen in NaCl-gesättigten Lösungen vs. THEREDA (Stand Cemdata18) ...	324
2.5	G. D. Miron, B. Lothenbach, and D.A. Kulik: Thermodynamic Modeling of cementitious systems: Cemdata18, CemGEMS, ongoing C-(A)-S-H model development, and integration with THEREDA	364
2.6	I. Paschke, D. Freyer: Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil 1 - Baustoffrezepturtypen und deren Eigenschaften	393
2.7	M. Pannach, I. Paschke und D. Freyer: Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil 2 - Thermodynamische Berechnung der Beständigkeit im Wirtsgestein Salz (Stand THEREDA)	413

2.8	U. Düsterloh: Geotechnische Anforderungen an Verschlussbauwerke im Salinar	423
2.9	D. Naumann, T. Popp: Wie messe ich was - mechanische Versuche zur Charakterisierung von Verschlussbaustoffen	441
2.10	E. Jahns und T. Popp: Hydraulische Versuchstechniken zur Charakterisierung von Verschlussbaustoffen	481
2.11	A.-W. Gutsch, E. Rigo, H. Alberts: Untersuchungsmethoden zur Charakterisierung von mineralischen Verschlussbaustoffen	501
2.12	W. Gräsle: Langzeitversuche - Kriechverhalten von M4-Salzbeton aus dem ERAM	528
2.13	N. Müller-Hoeppe: Zusammenfassung der Erfahrungen aus dem Barrierebau mit abbindenden Baustoffen – „Lessons Learnt“	556
2.14	M. Gruner und T. Popp: Großtechnische Versuche – Wissensstand zu den Materialeigenschaften Zement- und MgO-basierter Verschlussbaustoffe	586
2.15	F. Schmidt-Döhl: THC-Modellierung von zementbasierten Abdichtmaterialien und Verschlussbauwerken	618
2.16	M. Polster, C. Lerch, A. Carstensen, M. Heydorn, M. Herklotz, A. Hussein, N. Müller-Hoeppe, T. Schröpfer und A. Weis: Numerische Umsetzung des Abbindeverhaltens erhärtender Baustoffe	648
2.17	J. Wolf, M. Niemeyer und J. Kindlein: Bedeutung der geotechnischen Barrieren im Safety Case: Sicherheitskonzepte und die Darstellung des sicheren Einschlusses im einschlusswirksamen Gebirgsbereich	686

Vorwort

In dem Zeitraum vom 05.-07. September 2023 fand in Braunschweig der Workshop „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“ im Rahmen der Deutschen Arbeitsgemeinschaft für Endlagerforschung (DAEF) statt. An dem Workshop nahmen 60 Personen u.a. Vertreter von BMUV, BGE, BGR, GRS und Universitäten in Clausthal, Hamburg /TuTech sowie Freiberg teil.



Abb.: Teilnehmer des Workshops „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“, Braunschweig, 05.-07. September 2023

Ziel des Workshops war es, Experten zusammenzubringen und einen Überblick im Bereich zementbasierter Verschlussbauwerke zu geben. Es wurden Einblicke in die Entwicklung und Qualitätssicherung von Baustoffen sowie eine Übersicht über Baustoffuntersuchungen für Stilllegungsverfahren am Beispiel des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM) gegeben. Welche geotechnischen Anforderungen an Verschlussbauwerke zu stellen sind wurde diskutiert und bereits durchgeführte großtechnische Versuche unter dem Motto „lessons learned“ vorgestellt. Neben der Charakterisierung der mineralischen Verschlussbaustoffe wurden der derzeitige Stand der thermodynamischen Berechnung dieser Systeme aufgezeigt bis hin zur Bedeutung der Korrosion von zementbasierten Abdichtbauwerken in der Langzeitsicherheitsanalyse (LZS).

Die Organisation und Durchführung des Workshops erfolgte durch die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH (GRS), inhaltlich wurde der Workshop vom Arbeitskreis „Integrität von Verschlussbauwerken im Salinar (AKB)“ der Deutschen Arbeitsgemeinschaft Endlagerforschung (DAEF) vorbereitet.

Der Workshop knüpft an eine Reihe von Veranstaltungen (Fachgespräche & Workshops) zum Thema Verschlussbauwerke, Verschlussmaßnahmen bzw. Verschlussysteme an, die 1993 mit dem ersten Fachgespräch "Verschlussbauwerke für untertägige Hohlräume im Salinar und im Hartgestein - Kenntnisstand zur Auslegung und Materialien, offene Probleme" des Projektträgers des BMFT begründet worden sind; mit dem Workshop konnte somit das 30-jährige Jubiläum gefeiert werden. Im letzten Jahrzehnt fanden drei Fachgespräche des PTKA-WTE in Zusammenarbeit mit der GRS (2010) sowie in Zusammenarbeit mit der TU BAF (2015/2017) statt.

Begleitende Workshops zum Thema „Salt Repository Research, Design, and Operation“ finden jährlich statt und werden durch den PTKA, Sandia National Laboratories und BGE-TEC organisiert und veranstaltet.

Allen Vortragenden, Teilnehmern und Teilnehmerinnen, den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des AKB sowie den Mitarbeiterinnen der GRS, die an der Organisation des Workshops beteiligt waren, sei nochmals für ihr Engagement und die gewährte Unterstützung gedankt.

Thorsten Meyer

Arbeitskreis „Integrität zementbasierter Verschlussbauwerke im Salinar (AKB)“

Claudia Hommers, Friederike Richter
(Workshop Organisation)

Einführung

Im Rahmen von Fachgesprächen und Workshops werden regelmäßig Ergebnisse aus den einzelnen Forschungsprojekten präsentiert. Die inhaltliche Ausgestaltung des hier dokumentierten Workshops wurde im Rahmen von Fachgesprächen des Arbeitskreises „Integrität zementbasierter Verschlussbauwerke im Salinar (AKB)“ vorbereitet. Der Arbeitskreis wurde 2018 vor dem Hintergrund gegründet, dass Salz- und Sorelbetone als Versatz- und Abdichtmaterialien für Verschlussbauwerke eingesetzt werden sollen. Teilnehmende Organisationen sind die BAM Berlin, BGE, BGE-TEC, BGR, CSD, GRS, IfG, MPA-Braunschweig, TU Bergakademie Freiberg, TU Clausthal und TU Hamburg/Tu-Tech.

Innerhalb des Arbeitskreises werden Fragestellungen zur Baustoffintegrität dieser Materialien bearbeitet:

- experimentelle Methoden (Laborversuche, in-situ Versuche) und
- modelltheoretische Betrachtungen (THMC-Kopplungsprozesse) zum Abdichtungssystemverhalten von zementbasierten Verschlussbauwerken im Salinar,
- sowie die Langzeitsicherheit eines Endlagersystems mit zementbasierten Abdichtungssystemen (relevante Prozesse, Prozessmodelle und ihre Integration in die LSA).

Als wesentliches Ergebnis wird der derzeitige Stand von Wissenschaft und Technik aufgezeigt. Darauf basierend können Defizite formuliert und Empfehlungen für weiterführende Arbeiten gegeben werden.

Vor diesem Hintergrund wurden Schwerpunktthemen für diesen Workshop definiert:

- State of the Art – Was wollen und was müssen wir wissen?
- Geochemische Eigenschaften und Prozesse – Was heißt eigentlich beständig?
- Mechanische und hydraulische Prozesse
- Wie berechenbar sind THMC-Prozesse?
- Bedeutung der Korrosion von zementbasierten Abdichtbauwerken in der Langzeitsicherheitsanalyse (LZS)

Die vorstehend skizzierten Schwerpunktthemen sind anhand von Einzelaspekten in den jeweiligen Fachbeiträgen vertieft worden (s. auch Workshop-Programm).

Einleitung

Der langfristige Einschluss von Radionukliden und damit die Verhinderung des Übergangs in die Biosphäre ist das Ziel der Entsorgung radioaktiver Abfälle in geologischen Tiefenlagern. Für Endlager im Steinsalz wird dieses Ziel zum einen durch den undurchlässigen, ungestörten Teil der Wirtsgesteinsformation und zum anderen durch ein System von technischen Barrieren aus Verfüllmaterial sowie Schacht- und Streckenabdichtungen erreicht.

State of the Art – Was wollen und was müssen wir wissen?

Das Ziel ist also klar: Der sichere Einschluss von radioaktivem Abfall durch das Zusammenwirken von geologischen, geotechnischen Barrieren und dem Versatz von Grubenbauen. Mit Blick auf ein Endlager ist die Frage „Was wollen wir wissen?“ erlaubt. Eine von vielen möglichen Antworten: „Wissenschaftlich betrachtet - Alles!“ Interessierte Bürger möchten grundsätzlich wissen, ob ein Endlager – in jeder Hinsicht – sicher ist.

Was aber bedeutet „Alles“ oder „in jeder Hinsicht“? Eine scheinbar einfache und pragmatische Antwort: „Alles, was wichtig und notwendig ist, um die Langzeitsicherheit des Endlagers zu belegen.“ Doch welche Informationen zur Durchführung und Bewertung von Verschluss- und Verfüllmaßnahmen mit zementbasierten Baustoffen im Salinar sind wichtig und welche Eigenschaften sind schlussendlich zu bewerten - beginnend bei der Wahl eines geeigneten Baustoffs, dem Beleg seiner sicheren technischen Einsetzbarkeit, der Bewertung der Eigenschaften des Gebirges, vor allem auch im zukünftigen Zusammenwirken mit dem gewählten Baustoff, bis zu der Bewertung der Eigenschaften des jeweiligen Baustoffes, welcher zur Errichtung der Stilllegungsmaßnahme verwendet werden soll. Welche mechanischen, hydraulischen, thermischen und geochemischen Eigenschaften müssen bewertet werden, um einen sicheren Einschluss gewährleisten zu können? Welche relevanten Eigenschaften können nach Verschluss des Endlagers unter den verschiedenen zu erwartenden Prozessen für den Bewertungszeitraum abgeleitet und (prüfbar) dargestellt werden? Wesentlich sind zudem die Entwicklung und Anwendung von qualitätssichernden Maßnahmen für die Stilllegungsmaßnahmen, unter Berücksichtigung der jeweiligen standortspezifischen Gegebenheiten. Diese stellen einen entscheidenden Baustein in einem Genehmigungsverfahren dar. Als besondere Herausforderung sei an dieser Stelle der Bewertungszeitraum der jeweiligen Eigenschaften der Stilllegungsmaßnahmen von einer Million Jahre genannt, unter Berück-

sichtigung möglicher Wechselwirkungen zwischen Baustoff und Wirtsgestein, sowie möglichen Entwicklungen des Endlagersystems.

Bei der Baustoffentwicklung zementbasierter Baustoffe für verschiedene Stilllegungsmaßnahmen im Salinar kommt es neben der der Auswahl des Stoffsystems eines möglichen Baustoffs, auf die erforderlichen Frisch- und Festbetoneigenschaften zur Errichtung eines Verschlussbauwerks, auch mit Blick auf den Verbund mit dem umgebenden Wirtsgestein, bis zu den relevanten Eigenschaften der Stilllegungsmaßnahmen zur Bewertung der Langzeitsicherheit des Endlagersystems an. Hierfür werden Kenngrößen benannt, welche grundsätzlich ermittelt werden, um eine Langzeitsicherheit für den sicheren Einschluss radioaktiver Abfälle belegen zu können. In Bezug auf Entwicklung eines geeigneten Baustoffs, den Materialprüfungen und mögliche Eignungsnachweise sind die Analogien zum klassischen Hoch- und Tiefbau sichtbar, aber auch die Grenzen genormter Prüfverfahren und die Möglichkeiten nicht genormter Verfahren, aber allgemein anerkannten Prüfmethoden, zur Bewertung zementbasierter Verschlussbauwerke im Salinar. (Vorträge: Engelhardt et al., Rempel et al.)

Geochemische Eigenschaften und Prozesse – Was heißt eigentlich beständig?

Als Folge dieser Überlegungen und nachfolgenden Baustoffentwicklungen, gelten Salzbetone und Sorelbetone als geeignete Materialien für Dichtelemente für Strecken und Schächte im Salinar. Da in einer Salzumgebung stark salzhaltige Lösungen zu erwarten sind, ist für die Beurteilung der Langzeitstabilität dieser Baustoffe zu berücksichtigen, ob sich die Phasenzusammensetzung (Bindemittelphasen, Additive) im thermodynamischen Gleichgewicht mit einer möglichen Zuflußlösung befindet, deren Zusammensetzung von der Mineralogie des Wirtsgesteins abhängt. Andernfalls können die Dichtelemente aus Salzbeton oder Sorelbeton beim Eindringen von Sole in das Endlager durch wesentliche Veränderungen in der Phasenzusammensetzung und damit in den hydraulischen und mechanischen Eigenschaften beeinträchtigt werden.

Sorelbeton wird dabei aus kaustischem Magnesiumoxid (MgO) und einer konzentrierten MgCl₂-Lösung als Anmischlösung hergestellt. Über die exotherme Abbindereaktion entstehen basische Magnesiumchlorid-Hydrate, xMg(OH)₂·yMgCl₂·zH₂O (Sorelphasen), die Bindemittelphasen, welche zu einem verfestigten Gefüge kristallisieren. Als Zuschläge werden Salzgrus oder silikatische Hartgesteinskörnung (Sand/Kies) verwendet.

Salzbeton wird aus Zement und gesättigter Natriumchlorid-Lösung hergestellt. Der im Normalbeton herkömmliche Sand/Kies-Zuschlag wird durch Salzgrus ersetzt. Je nach

konkreter Rezeptur können noch Zusätze wie Flugasche, Kalksteinmehl, etc. enthalten sein. Über die exotherme Abbindereaktion entsteht ein verfestigtes Gefüge mit der Bildung von Calcium(alumo)silikat-Hydraten (C(A)SH-Phasen), den Bindemittelphasen. Unter der Voraussetzung, dass die Zuschläge und Zusätze in den Baustoffrezepturen inert sind bzw. sich im thermodynamischen Löslichkeitsgleichgewicht mit potentiell zutretenden Salzlösungen befinden (wie Steinsalzgrus mit gesättigten NaCl-Lösungen), ist für Aussagen zur Langzeitbeständigkeit das Reaktionsverhalten der Bindemittelphasen zu bewerten.

Im Fall der Sorelphasen liegt mittlerweile eine umfassende Datenbasis vor. Die im abgebundenen Baustoff oft vorliegende 3-1-8-Bindemittelphase steht im Gleichgewicht mit $MgCl_2$ -Lösungen als auch mit NaCl-gesättigten Lösungen, die geringe $MgCl_2$ -Gehalte (ab 0,5 molal bei 25°C; ab 1 molal bei 40°C) aufweisen. Ebenso besteht ein Löslichkeitsgleichgewicht mit komplexen Lösungen des hexären Systems der ozeanischen Salze, wie Q- oder R-Lösung, IP 21, IP 19 etc. Die weitere mögliche Bindemittelphase 5-1-8 (Bindemittelphasenbildung in Abhängigkeit von der Baustoffrezeptur), ist keine Gleichgewichtsphase und wandelt sich bei Lösungskontakt in die 3-1-8-Phase (ggf. und/oder $Mg(OH)_2$) um. Das stellt jedoch kein Ausschlusskriterium für den Nachweis der Langzeitbeständigkeit von Bauwerken mit dieser Bindemittelphase dar. Die Phasenumwandlung findet im Oberflächenkontaktbereich statt, verbunden mit einem Festphasenzuwachst im primär lösungszugänglichen Porenraum, wodurch das Eindringen weiterer Lösung rückläufig ist. Die Integrität des Bauwerkes bleibt damit erhalten. Der Nachweis der Langzeitbeständigkeit kann daher zusätzlich noch über einen Integritätsnachweis geführt werden. (Vortrag: Pannach et al. und Paschke et al.)

Im Fall des Salzbetons zeigen die bisherigen experimentellen Befunde, dass Salzbeton in Gegenwart NaCl-gesättigter Lösung beständig ist. Die bei Lösungskontakt einsetzende Substitution von Calcium durch Natrium in den CSH-Phasen führt wahrscheinlich zu keinem Integritätsverlust des Betonbauwerkes. Enthält die Zutrittslösung jedoch Magnesium, kommt es zur Umbildung der CSH-Phasen in MSH-Phasen. Dabei gehen Gefügeveränderungen einher, die mit großer Wahrscheinlichkeit zum Integritätsverlust führen. (Vortrag: Häusler et al.)

Mechanische und hydraulische Prozesse

Die Konstruktionen der Verschlussysteme basierend vorzugsweise aus zement- oder MgO-basierten Baustoffen, müssen zur Gewährleistung der notwendigen Dicht- und

Tragfunktion des geotechnischen Barriereelements (= Integrität) bestimmte hydraulische und/oder mechanische Eigenschaften besitzen. Danach erfolgt die Bewertung der Funktionalität dieser Baustoff-basierten Elemente primär auf Basis geeigneter hydro-mechanischer Untersuchungen im Labor- oder Feldmaßstab, mit denen wesentliche Eigenschaftsparameter direkt gemessen (z.B. Druckfestigkeit) oder indirekt abgeleitet werden (z.B. Permeabilität des Baustoffs oder eines Abdichtbauwerks). Die Ergebnisse bilden gleichzeitig die Basis für weitergehende Analysen, die z.B. mittels numerischer Verfahren, in der Nachbetriebsphase eines Endlagers oder Deponie langfristig wirkenden Prozesse und Einwirkungen simulieren und hinsichtlich der langzeitigen Integrität von Dicht- oder Widerlagerelementen bewerten (Übersichtsvortrag: Düsterloh).

Bei den zur Charakterisierung der hydro-mechanischen Baustoffeigenschaften notwendigen Parametern handelt es sich um ein weites Spektrum, wobei sich die Eigenschaften mit dem Abbindeprozess bzw. in Abhängigkeit von den äußeren Einwirkungen (z.B. Spannung, Temperatur) zeitlich ändern können. Ziele und Bestimmungsmethoden der durchzuführenden experimentellen Untersuchungen hängen deshalb wesentlich von den Anforderungen an ein Verschlussbauwerk sowie vom Nachweisverfahren für das geotechnische Barriersystem ab. Das Spektrum der mechanischen und hydraulischen Untersuchungen (sowie der hier nicht betrachteten thermischen Untersuchungen) umfasst allgemein u.a.:

- Rheologische Frischbetoneigenschaften bezüglich Anmischverhalten und Förderbarkeit des Baustoffs sowie als Ausgangspunkt für ein Qualitätssicherungsprogramm
- Charakterisierung des Hydratationsprozesses, u.a. anhand der Wärmeentwicklung sowie der daraus resultierende Spannungs- und Verformungsänderungen des Baustoffs, u.a. Festigkeit und Durchlässigkeit (einschließlich potentieller Rissbildung)
- Untersuchung der Festbeton-Eigenschaften nach Ende des Abbindeprozesses unter der Maßgabe, dass sich die Baustoffe mit der Umgebung in einem geochemischen Gleichgewicht befinden. Hierbei werden die langfristig zu erwartenden mechanisch/hydraulischen Einwirkungen simuliert, womit eine Prognose der Eigenschaften für den langzeitigen Betrachtungszeitraum möglich wird.
- Untersuchungen zur Baustoffstabilität und chemischen Beständigkeit

Bezogen auf den Labormaßstab stehen für die Untersuchung der hydro-mechanischen Eigenschaften, entsprechend den Anforderungen für die Planung, Bauwerkserstellung und den Funktionszeitraum, teilweise standardisierte (Norm-)Untersuchungsverfahren zur Verfügung. Abhängig vom Anforderungsspektrum können teilweise aber auch spezielle Untersuchungen durchgeführt werden, die Baustoff- (z.B. Bestimmung des Expansionsdruckes bei Zutritt von $MgCl_2$ -haltigen Lösungen in den D4-Baustoff) oder anwendungsspezifisch (z.B. Permeabilität für Dichtsysteme) sein können. Weiterhin ist auch die Wechselwirkung mit dem umgebenden Gebirge, z.B. die Kontaktfläche zwischen Baustoff und dem Salzgestein als hydro-mechanische Schwächefläche von Relevanz.

Zur Messung der Permeabilität werden ausgehend von der Darcy-Grundgleichung sowohl stationäre als auch instationäre Verfahren unter Verwendung von Gas oder Lösungen (z.B. Wasser oder unterschiedliche Salzlösungen) sowie gegenüber Salzgesteinen inerte Fluide (z.B. Kohlenwasserstoffe) eingesetzt. Für die Messung des kapillaren Sperrdrucks ist, neben dem Messfluid und dem Messverfahren, die Vorbehandlung der Proben (z.B. Trocknung bzw. Aufsättigung) wesentlich für das Messergebnis, wobei gleichzeitig die Durchführung der Messungen sehr zeitaufwändig sein kann. Insofern stellen diese Arten der Untersuchungen keine Standarduntersuchungen dar, sondern erfordern ein sehr qualifiziertes Messkonzept. (Vortrag: Jahns et al.)

Bezogen auf mechanische Standarduntersuchungen an Verschlussbaustoffen können folgende Parameter bestimmt werden: Kenngrößen zur Charakterisierung des Probenausgangszustands, z.B. Rohdichte, Ultraschallgeschwindigkeiten: V_p und V_s sowie abgeleitete dynamische Elastizität, Einaxiale Druckfestigkeit (Zylinder und/oder Würfel), Elastische Eigenschaften (u.a. statischer E-Modell oder Querkontraktionszahl), Einaxiale Zugfestigkeit (direkt oder als Spaltzugfestigkeit), Scherfestigkeit und MOHR-COULOMB-Parameter (vom Baustoff bzw. im Kontakt zum Gebirge), Triaxiale Druckfestigkeit und Verformungsverhalten sowie Dilatanzfestigkeit als Indikator für Rissbildung (abhängig von den einwirkenden Belastungen und Verformungen) sowie Druckkriechen (isotrop und/oder deviatorisch) und Zugkriechen. (Vorträge: Nauman & Popp et al., Gräsele et al.)

Bei den Untersuchungsmethoden zur Charakterisierung von mineralischen Verschlussbaustoffen ist vor allem auf die Relevanz der Simulation von temperaturinduzierten Zwangsspannungen während der Erhärtungsphase und wegen der Zwangbehinderung von Temperaturdehnungen durch angrenzende Bauteile hinzuweisen. Diese führen dazu, dass Festigkeitswerte gegenüber Standardbetonuntersuchungen in einem sehr

weiten Zeitraum (1-120 Tagen) zu ermitteln sind. Darüber hinaus ist auch das Kriechen sowohl unter Zug- als auch unter Druckbeanspruchung zu untersuchen. Weiterhin können bei Salzbeton-basierten Baustoffen im Unterschied zu den MgO-basierten Baustoffen auch Schwindeffekte auftreten, die größer als etwaige Temperaturdehnungen während der Aufheiz- und anschließenden Abkühlphase der Erhärtung sein können. Mit Blick auf die Langzeitstabilität sind neben der Ermittlung der statischen Materialeigenschaften auch Kenntnisse darüber erforderlich, wie sie sich unter den gegebenen korrosiven Bedingungen verändern können. Dies macht gleichzeitig auch Simulationsberechnungen mit entsprechenden Reaktionsthermen, z.B. unter Berücksichtigung von Diffusionsprozessen unabdingbar, für die entsprechende Materialparameter bekannt sein müssen. In der Vergangenheit sind dafür sehr aufwändige Untersuchungen durchgeführt worden. (Vortrag: Gutsch & Rigo et al.)

Im Bereich der experimentellen Untersuchungen wurde während der Tagung festgestellt, dass die vielfältigen Randbedingungen auf ein Bauwerk im Technikumsmaßstab einfacher untersucht werden können als mit Versuchsbauwerken, andererseits lässt sich der Einfluss des Gebirges, z.B. auf die Druckentwicklung, nur am Versuchsbauwerk zuverlässig messen. Bei solchen Bauwerken ist eine Funktionalitätsprüfung nach Errichtung durch eingebaute Sensorik von großem Vorteil. Hervorgehoben wurde der Einfluss der Temperatur auf das Kriech- und Schwindverhalten. Hingewiesen wurde auch darauf, dass sich die Auflockerungszone im konturnahen Gebirgsbereich neu bildet. Der Zeitraum vom Nachschneiden der Auflockerungszone bis zur Erstellung des Bauwerks muss deshalb begrenzt sein. Die Dicke der Auflockerungszone ist vorzugsweise durch Messung zu ermitteln. Abschließend sei darauf hingewiesen, dass die Bedeutung des Begriffes Langzeitbeständigkeit zu definieren ist.

Laborexperimente im Rahmen von F&E-Projekten sowie in-situ-Tests von Einzelkomponenten (thermisch, hydraulisch, mechanisch, chemisch) dienen als Ergänzung von in-situ-Untersuchungen von Streckenabdichtungen wie sie im Zusammenhang mit der Schließung des Endlagers Morsleben sowie den Vorkehrungen des Notfallkonzeptes für das Endlager Asse geplant wurden und werden, um zur langfristigen Sicherheit beizutragen. Ausgeführte in-situ-Versuche zur Machbarkeit und Funktionalität von Verschlussystemen bzw. Teilaspekten z.B. in Teutschenthal (CARLA) und im Rahmen der Stilllegung des ERA Morsleben haben aber auch gezeigt, dass eine unmittelbare Übertragung der an klein-maßstäblichen Prüfkörpern ermittelten Erkenntnisse zum thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischen Verhalten einzelner Abdichtungskomponenten auf die in situ zu errichtende Bauwerksdimension nur begrenzt möglich ist.

Ausgehend von nicht vollständig realisierten Planungen Anfang der 90iger Jahre (Asse-Vordamm) hat sich seit Beginn der 2000er Jahre beginnend mit dem Strömungsbarrierenbau in der Asse, über das Vorhaben Carla mit den Großbauwerken GV1 und GV2 sowie dem Abdichtbauwerk aus Salzbeton im ERAM bis aktuell zum Halbdamm (im Vorhaben STROEFUN) ein erheblicher Wissen- und Erfahrungsgewinn ergeben. Wichtige Forschungsschwerpunkte waren dabei:

- Langzeitbeständigkeit - Korrosion von Salz- und Sorelbeton
- Reduzierung der Ungewissheit lokaler Korrosion
- Betonierabschnittsgrenzen/Betonierfugen
- Risse (Trennrisse)
- Kontaktzone zwischen Baukörper und Wirtsgestein Salz

Als Ergebnis kann festgestellt werden, dass zur Errichtung lösungsdichter und langzeitbeständiger Abdichtbauwerke im Steinsalz u.a. eine Voraussetzung ist, dass das Fluiddruckkriterium in der ALZ bzw. der Kontaktzone eingehalten wird, was der Fall ist, wenn das Gebirge auf das Verschlusselement aufgekrochen ist und somit eine durchgehende Anbindung von Salzkontur und Baukörper erreicht wird. (Vortrag: Müller-Hoeppe)

Beim Vergleich aus Großversuchen mit unterschiedlichen MgO-Rezepturen, zeigte der MgO-C3 eine Besonderheit, da er beim Abbinden einen mehrere MPa großen Expansionsdruck entwickelt, der zumindest temporär bei einem Großversuch im Bergwerk Teutschenthal über mehrere Jahre hinweg erhalten blieb, wobei daran gekoppelt gleichzeitig die integrale, hydraulische Dichtheit des Bauwerks zunahm. Dies eröffnet die Option eines sofort wirksamen Schachtverschlusses, weil damit über einen wirksamen Druck auf der Kontaktzone und die ALZ eine Umströmung des Bauwerks (unter Verletzung des Minimalspannungskriteriums) verhindert wird. Darüber hinaus erhöht sich das Sicherheitsniveau von Verschlussystemen grundsätzlich, wenn aus verschiedenen Baustoffen konstruierte Einzelelemente miteinander kombiniert werden (diversitäre Ausführung).

Während des Workshops wurde auch ein grundsätzlicher Ansatz zur vergleichenden Bewertung der Ergebnisse aus unterschiedlichen Großversuchen sowie als Bemessungsgrundlage für konkrete Schacht- oder Streckenverschlussbauwerke auf Basis eines „Grenzvolumenstroms“ vorgestellt. Es wird empfohlen, den in einem Versuch über längere Zeiträume gemessenen eintretenden Volumenstrom auf die Querschnittfläche des Dichtelementes (z.B. als $\text{m}^3/\text{a} / \text{m}^2$) zu normieren. (Vortrag: Gruner et al.)

Es ergeben sich als wesentliche Kernaussagen:

- Die experimentelle Charakterisierung der hydro-mechanischen Baustoffeigenschaften basiert auf einem sehr großen methodischen Spektrum, das über die ansonsten in der Baustoffindustrie üblichen Normverfahren hinausgeht. Unabhängig davon sind die eingesetzten und teilweise speziell zur Bearbeitung eingesetzten Untersuchungsmethoden bei Berücksichtigung entsprechender Qualitätsanforderungen hinreichend zuverlässig.
- Aussagen zum Langzeitverhalten von mineralischen Baustoffen (z.B. Salzbeton oder MgO-Baustoffe) erfordern aber Versuchsserien, die möglichst lange Zeiträume (mindestens bis zum vollständigen Abbinden oder aber für hydraulische Untersuchungen möglichst bis zum Erreichen stationärer Zustände) abdecken sollen. In der Konsequenz können dafür Untersuchungszeiträume bis zu mehreren Jahren erforderlich sein.
- Bezogen auf mögliche Korrosionsprozesse gibt es keine standardisierten Ansätze, die sicherstellen, dass repräsentative Rahmenbedingungen z.B. für ein Anströmen von ausreichend großen Baustoffprüfkörpern unter definierten Spannungsbedingungen vorliegen (z.B. Vermeidung einer Auflockerung durch mechanische Vorschädigung). Hier gibt es deshalb auch einen wesentlichen methodischen Entwicklungsbedarf.
- Die integrale Dichtheit und mechanische Stabilität eines Bauwerks hängen jeweils von der Wechselwirkung mit dem umgebenden Gebirge ab (z.B. von einer möglichen Umströmung über die ALZ bzw. die Kontaktzone bzw. dem Aufkriechen des Salzgebirges auf das Bauwerk), weshalb (1) nicht nur statische Zustände, sondern (2) auch zeitabhängige Prozesse (z.B. mittels Kriech-, Schwind- und Korrosionsversuchen) sowie (3) auch die Wechselwirkung mit dem Gebirge (z.B. über Haftzug- oder Scherversuche) untersucht werden müssen.
- Die resultierenden Parameter bilden u.a. eine wichtige Grundlage für Prognoserechnungen, z.B. im Rahmen von Sicherheitsbetrachtungen für Integritätsanalysen). Die Zuverlässigkeit der gemessenen Parameter und deren Repräsentativität dafür ist im Rahmen von Vergleichsuntersuchungen (z.B. bei verschiedenen Untersuchungslabors) sicherzustellen.
- Die vorliegenden Ergebnisse aus verschiedenen Demonstrationsbauwerken (z.B. Asse oder Morsleben) belegen, dass es mittels der vorhandenen MgO-Baustoffrezepturen möglich ist, nachweislich langzeitsichere und hinreichend dichte Abdichtungen für Schächte oder Strecken im Wirtsgestein Salz zu bauen. Der

Einbauzustand (initiale Dichtigkeit) verbessert sich im kriechfähigen Salzgebirge mit zunehmender Einspannung: Abnahme der Permeabilität.

- Die hydraulische Wirksamkeit eines Bauwerks lässt sich realitätsnah über den spezifischen (auf die Bauwerksgröße normierten) Grenzvolumenstrom (und nicht allein mit der Permeabilität) beschreiben.

Wie berechenbar sind THMC-Prozesse?

Experimentelle Untersuchungen dienen dem Prozessverständnis z.B. von Korrosionsprozessen und dienen zur Validierung von modelltheoretischen Betrachtungen. Modellrechnungen können daher experimentell beobachtete Prozesse widerspiegeln und Prognosen über Zeiträume geben, die experimentell nicht mehr zugänglich sind. Basierend auf geochemischen Modellrechnungen können weitergehende Berechnungen unter der Berücksichtigung von Temperatur, Hydraulik und Mechanik durchgeführt werden.

Doch im Vorfeld des AKB-Workshops kam die provokante Frage auf: Gibt es überhaupt THMC-Untersuchungen (T-thermisch, H-hydraulisch, M-mechanisch, C-chemisch, B-biologisch, R-radiologisch)? Experimentell ist dies sicherlich der Fall. Jeder Versuch mit einem Probekörper mit Lösungsbeaufschlagung stellt ein solches Experiment mit THMC-Prozessen dar. Rechnerisch muss man feststellen, dass eine echte Kopplung von THMC-Prozessen innerhalb eines umfassenden Modells derzeit wahrscheinlich nicht existiert. Auch wenn dies technisch möglich ist, steht die Frage im Raum, ob die erzielbaren Rechenzeiten praktikabel wären. Die Frage: „Wie berechenbar sind THMC-Prozesse“ lässt sich daher einfach beantworten: Zurzeit nicht. Berechenbar sind jedoch THC- und THM-Prozesse, ggf. auch mit einem Datenaustausch zwischen den Algorithmen. Eine Kopplung mit biologischen bzw. radiologischen Prozessen ist zurzeit nicht in Sicht.

Die THC-Modellierung im Bereich der Endlagersicherheit hat durch das Langzeitprojekt THEREDA (Thermodynamic Reference Database) einen großen und entscheidenden Schritt nach vorne gemacht. Die Qualität der thermodynamischen Daten hat sich seit dem Beginn entsprechender Modellierungen in den 1990er Jahren durch experimentelle und theoretische Arbeiten wesentlich verbessert, auch wenn es noch einige Lücken und Verbesserungsbedarf gibt. Sehr deutlich wurde in dem Workshop, dass jedoch die Dichten bzw. die molaren Volumina der beteiligten Spezies eine größere Aufmerksamkeit erfordern. Sie sind notwendig, um Volumenveränderungen durch chemische Reaktionen

korrekt wiedergeben zu können, und um Veränderungen der Porosität und Porenstruktur von Werkstoffen beschreiben zu können. Diese sind wiederum von entscheidender Bedeutung für alle Transportprozesse in der THC- und der THM-Modellierung. Die Ermittlung von Kristallisationsdrücken wäre ein interessanter Aspekt für die mechanische Modellierung. Solche Berechnungsmethoden stehen aber noch am Anfang. Bei den realisierten THC-Modellen ist die Berechnung veränderter Transportkenngrößen durch die ablaufenden chemischen Reaktionen wahrscheinlich der am meisten verbesserungswürdige Teil entsprechender Algorithmen, mit einem deutlichen Forschungsbedarf. (Vortrag: Schmidt-Döhl et al.)

Es existieren thermische und mechanische Stoffmodelle für die Materialien Sorelbeton und Salzbeton. Die thermische Modellierung von Herstellungsprozessen unter Berücksichtigung der Hydratation und die Modellierung von Dehnungen funktioniert recht gut. Die mechanische Modellierung und damit die Bestimmung von Dehnungen und Spannungen bzw. Drücken ist demgegenüber deutlich schwieriger. Die Abbildungsqualität hängt hierbei stark von der Modellierung der sich gleichzeitig überlagernden Teilprozesse (elastisch, plastisch, autogen und viskos) ab. Noch schwieriger gestaltet sich die rechnerische Beschreibung von Rissbildungen mit Hilfe der gängigen kontinuumsmechanischen Ansätze. (Vortrag: Polster et al.)

Mineralische Bindemittel verändern sich durch wegfallende (Hüttensand, Steinkohleflugaschen) und neue (metallurgische Schlacken, Tone und Metatone) Komponenten. Die langfristige Verfügbarkeit der Ausgangsstoffe ist daher ein wichtiger Aspekt der Baustoffentwicklung. Dies hat Folgen für Berechnungen unter Berücksichtigung chemischer Prozesse. Auch die Arbeiten an der thermodynamischen Datenbasis müssen sich darauf einstellen.

Im Fall von Salzbeton existieren für die C(A)SH-Bindemittelphasen umfassende Löslichkeitsdaten in Gegenwart von Wasser bzw. wässrigen Lösungen. Es wurde von Lothenbach et al. (2019) die umfangreiche Datenbasis Cemdata18 entwickelt. Diese beinhaltet u.a. thermodynamische Daten zu CSH- und MSH-Phasen, Ca- und Mg-Aluminaten, Zeolithen sowie Alkali- und Erdalkalimetall-haltigen Zementphasen. Dieser Datensatz ist ausschließlich für wässrige, nicht-salinare Systeme evaluiert. 2020 wurde er in die Datenbasis für hochsalinare Systeme, THEREDA, implementiert. Das für Salzbeton relevante CNASH Mischungsmodell ist ebenfalls implementiert. (Vortrag: Miron et al.)

Auch für die Sorelphasen liegen inzwischen gute thermodynamische Daten vor. Die Beständigkeit im Kontakt mit salinaren Lösungen ist berechenbar. Die Umwandlung der 5-1-8 Rezeptur (Sorelbeton) in die 3-1-8 Phase erfordert den nachträglichen Lösungszutritt. Ohne diesen bleibt die 5-1-8- Phase stabil. Die Umwandlung funktioniert auch mit reiner NaCl-Lösung, weil sich der Mg Gehalt durch die partielle anfängliche Zersetzung des Sorelbetons selbst einstellt. Die Umwandlung ist mit einer exothermen Reaktion und einem Druckanstieg verbunden.

Geochemische Modellrechnungen zur Abbildung der Löslichkeitsgleichgewichte der Sorelphasen sind mit der Thermodynamischen Referenzdatenbasis - THEREDA (www.thereda.de) seit 2024 weitreichend möglich. Auf Basis der experimentellen Löslichkeitsdaten wurde ein Pitzerdatensatz entwickelt, mit welchem polytherme Berechnungen im System der ozeanischen Salze möglich sind. Dennoch sollte zur Bewertung des Langzeitverhaltens und damit der Beständigkeit von Salzbeton in salinärer Umgebung in Zukunft die experimentelle Datenlage erweitert werden, um auf deren Basis auch die mathematischen Modelle zu verbessern und die Prognoseunsicherheit zu verringern.

Bedeutung der Korrosion von zementbasierten Abdichtbauwerken in der Langzeitsicherheitsanalyse (LZS)

Das Nachweiskonzept beschreibt die Vorgehensweise, wie die Sicherheit eines Endlagersystems zu bewerten ist. Im Nachweiskonzept werden auf Basis des Sicherheitskonzeptes die für eine Sicherheitsaussage erforderlichen Nachweise formuliert, die umfassend beschreiben, wie die Sicherheit des Endlagersystems für die Nachverschlussphase nachgewiesen werden soll.

Entsprechend den internationalen Empfehlungen und dem international anerkannten Vorgehen, muss der Nachweis der radiologischen Langzeitsicherheit auf einem fundierten Verständnis des Endlagersystems und der darin ablaufenden, möglicherweise sicherheitsrelevanten Merkmale, Ereignisse und Prozesse (nach den englischen Begriffen „features, events and processes“ zusammenfassend als FEP bezeichnet) beruhen. Der Nachweis umfasst dabei nicht nur eine radiologische Bewertung (den sicheren Einschluss innerhalb des Grubengebäudes bzw. die resultierende Konsequenz in der Biosphäre). Für den Nachweis in der Nachverschlussphase sind zudem eine Bewertung eines möglichen zukünftigen menschlichen Eindringens in das Endlager (Human Intrusion) und die Bewertung der Kritikalität zu bewerten.

Die Auslegung der Verschlussbauwerke erfolgt mit Modellrechnungen, bei denen gekoppelte thermo-mechanische, hydraulische und geochemische Prozesse berücksichtigt werden. Dabei werden die folgenden Aspekte untersucht:

- Rissbeschränkung,
- Standsicherheit,
- Dauerhaftigkeit (Alterungsbeständigkeit),
- integrale Permeabilität sowie
- Wahrscheinlichkeit des Ausfalls.

Diese Nachweise sind mindestens für alle zu betrachtenden Lastfälle, die sich aus den erwarteten Entwicklungen ableiten, zu erbringen.

Die Stabilität von Salz- und Sorelbetonen sowie das Ausmaß der Integritätsänderung durch die Reaktion im Kontakt mit salinaren Lösungen kann durch Experimente und geochemische Modellrechnungen abgeschätzt werden und ist bei der langfristigen Sicherheitsbewertung zu berücksichtigen. Zur Beurteilung der zukünftigen Entwicklung des Endlagers sind daher ausreichende Kenntnisse des Materialverhaltens und der hydraulisch-mechanischen Beständigkeit von Abdichtungen erforderlich, und es müssen entsprechende mathematische Modelle vorhanden sein, um Vorhersagen über die langfristige Sicherheit des Endlagers treffen zu können. Daher muss ein Prozessmodell formuliert werden, um das Langzeitverhalten von Abdichtungen aus Salz- und Sorelbetonen zu beschreiben und den hydraulischen Widerstand und das Transportverhalten von Radionukliden durch das Abdichtungselement bzw. seine Umgebung (EDZ) zu beurteilen. (Vorträge: Wolf et al. und Niemeyer et al.)

Resümee

Das Thema Betonkorrosion im Salinar wird seit nunmehr ca. 30 Jahren intensiv auf zahlreichen Fachgesprächen des Projektträgers mit dem Ziel diskutiert, vorhandene Ungewissheiten zu reduzieren, um so die Robustheit von Sicherheitsaussagen im Zusammenhang mit der Endlagerung radioaktiver Abfälle im Salinargestein zu erhöhen.

Um dieses Ziel zu erreichen wird der Stand der Kenntnisse zum System- und Prozessverständnis zum Baustoff unter Nennung der noch erkennbaren Ungewissheiten dargestellt. Es hat sich gezeigt, dass für ein umfassendes Verständnis eines Baustoffs und einer nachvollziehbaren Bewertung seiner Eigenschaften unter verschiedenen möglichen Randbedingungen eines Endlagers und für sehr lange Zeiträume der gesamte „Schaffungsprozess“ eines Baustoffs bis hin zu dem geplanten Einsatz und der damit im Zusammenhang stehenden Funktionalität zu betrachten sind.

Die Gesamtheit der Beiträge des Workshops deckt das Spektrum dieser notwendigen Betrachtungen ab. So werden aus dem Sicherheitskonzept eines Endlagers die einzelnen Bauwerke, bei denen der Baustoff Beton zum Einsatz kommt, identifiziert und die daraus folgenden Sicherheitsfunktionen und erforderlichen Eigenschaften konkretisiert. Es lässt sich eine Methodik darstellen, wie ein konkreter Baustoff zu entwickeln ist, damit er die an ihn gestellten Anforderungen erfüllt und wie diese dann in Form von Qualitätssicherungsprogrammen gewährleistet werden können.

Die bereits durchgeführten Forschungsvorhaben haben wesentlich dazu beigetragen, dass mittlerweile ein umfassendes Prozess- und Systemverständnis vorliegt, das unter Berücksichtigung vorliegender Modellierungsmethoden eine zuverlässige Prognose der Entwicklung von Eigenschaften des Baustoffs Beton in einem Endlagersystem erlaubt. Noch bestehende Ungewissheiten können durch weiterführende Forschungen reduziert werden, jedoch sind bereits heute bei vorliegenden konkreten Planungen und bekannten Einflussgrößen, qualifizierte Sicherheitsaussagen auf Grundlage des bereits vorhandenen Kenntnisstandes möglich.

Unabhängig von der Fragestellung, inwieweit noch weiterer Forschungsbedarf besteht, hat sich gezeigt, dass die Durchführung und kontinuierliche Weiterführung derartiger Workshops einen wesentlichen Beitrag zum fachübergreifenden Verständnis und zum generationsübergreifenden Wissenserhalt liefert.

Workshop Programm

Dienstag, 5. September 2023

14:00 Uhr	Begrüßung & Einführung Forschungsförderung durch das BMUV	T. Meyer, GRS S. Mrugalla, BMUV
15:00 – 15:30 Uhr	Kaffee	
15:30 – 17:00 Uhr	State of the Art – Was wollen und was müssen wir wissen? Strategie zur Entwicklung von Baustoffen Übersicht über Baustoffuntersuchungen für Stilllegungsverfahren am Beispiel des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM) Qualitätssicherung von Baustoffen	M. Heidmann-Ruhz, BGE J. Engelhardt, BGE-TEC F. Rempel, BGE J. Engelhardt, BGE-TEC
17:30 – 19:30 Uhr	Ice Breaker Event	
20:00 Uhr	Stadtführung - Nachtwächtertour	

Mittwoch, 6. September 2023

09:00 – 10:30 Uhr	Geochemische Eigenschaften und Prozesse – Was heißt eigentlich beständig? Löslichkeit von CSH-Phasen in NaCl-gesättigten Lösungen – vs. THEREDA (mit Stand CEMDATA18) CEMDATA18/THEREDA and ongoing development to C(A)SH model(s) Magnesiabaustoff - Stand von W&T: - Baustoffrezepturen und deren Eigenschaften - Thermodynamische Berechnung der Beständigkeit im Wirtsgestein Salz (Stand THEREDA)	D. Freyer, T. Meyer F. Häusler, TUBAF D. Miron, PSI I. Paschke, TUBAF M. Pannach, TUBAF
10:30 – 11:00 Uhr	Kaffee	
11:00 – 12:30 Uhr	Mechanische und hydraulische Prozesse I Geotechnische Anforderungen an Verschlussbaustoffe im Salinar Wie messe ich was - mechanische Versuche zur Charakterisierung von Verschlussbaustoffen Hydraulische Versuchstechniken zur Charakterisierung von Verschlussbaustoffen	A. Gutsch, B. Laurich U. Düsterloh, TUC D. Naumann, IfG E. Jahns, GL Test Systems

Mittwoch, 6. September 2023 (Fortsetzung)

12:30 – 13:30 Uhr	Lunch	
13:30 – 15:00 Uhr	<p>Mechanische und hydraulische Prozesse II</p> <p>Untersuchungsmethoden zur Charakterisierung von mineralischen Verschlussbaustoffen</p> <p>Langzeitversuche - Kriechverhalten von M4-Salzbeton aus dem ERAM</p> <p>Zusammenfassung der Erfahrungen aus dem Barrierebau mit abbindenden Baustoffen</p>	<p>T. Popp, U. Düsterloh</p> <p>A. Gutsch, E. Rigo, MPA Braunschweig</p> <p>W. Gräsle, BGR</p> <p>N. Müller-Hoeppe, BGE-TEC</p>
15:00 – 15:30 Uhr	Kaffee	
15:30 – 16:30 Uhr	<p>Mechanische und hydraulische Prozesse III</p> <p>Großtechnische Versuche - Wissensstand zu den Materialeigenschaften zement- und MgO-basierter Verschlussbaustoffe</p>	<p>T. Popp, U. Düsterloh</p> <p>M. Gruner, TUBAF</p> <p>T. Popp, IfG Leipzig</p>
16:30 – 18:30 Uhr	Empfang – Möglichkeiten des interdisziplinären wissenschaftlichen Austausches	
19:00 – 21:00 Uhr	Dinner	

Donnerstag, 7. September 2023

09:00 – 10:30 Uhr	<p>Wie berechenbar sind THMC-Prozesse?</p> <p>THC-Modellierung von zementbasierten Abdichtmaterialien und Verschlussbauwerken</p> <p>Numerische Umsetzung des Abbindeverhaltens zementbasierter Baustoffe</p>	<p>F. Schmidt-Döhl, C. Lerch</p> <p>F. Schmidt-Döhl, TUH</p> <p>C. Lerch, M. Polster, BGE</p>
10:30 – 11:00 Uhr	Kaffee	
11:00 – 12:30 Uhr	<p>Bedeutung der Korrosion von zementbasierten Abdichtbauwerken in der Langzeitsicherheitsanalyse (LZS)</p> <p>Grundsätzliches Vorgehen – Sicherheitskonzept</p> <p>Umsetzung der FEP / Szenarien in den Modellen der LZS</p>	<p>J. Kindlein, M. Niemeyer</p> <p>J. Wolf, GRS</p> <p>M. Niemeyer, NU</p>
12:30 – 14:00 Uhr	Lunch	
14:00 – 15:00 Uhr	<p>Resümee</p> <p>Closure</p>	<p>M. Mohlfeld / BGE</p> <p>T. Meyer</p>
15:00 Uhr	Kaffee	
	Ende des Workshops	

1 Tagungsbeiträge – Fachpublikationen

- 1.1 H.-J. Engelhardt¹, M. Heidmann-Ruhz², L. von Borstel¹, H. Räuschel¹,
F. Rempel² und A. Carstensen²:

Strategie zur Entwicklung von Baustoffen

¹ BGE TECHNOLOGY GmbH, Peine, Deutschland

² Bundesgesellschaft für Endlagerung (BGE), Peine, Deutschland

Email: Joachim.Engelhardt@bge.de

Zusammenfassung

Für den Einsatz im Salinar werden Spezialbaustoffe benötigt, die für die spezifischen Anforderungen des jeweiligen Standorts entwickelt werden müssen. Verfüll- und Abdichtmaterialien enthalten Salz, um Schädigungen des Wirtsgesteins durch Lösungen zu vermeiden. Die Entwicklung dieser Baustoffe erfordert die Durchführung eines umfangreichen Arbeitsprogramms, wobei ausgehend von den Anforderungen an den Baustoff Prüfkriterien und Anforderungen an die Ausgangsstoffe hergeleitet werden, wodurch das Baustoffsystem festgelegt ist. Der Umfang des Arbeitsprogramms kann erheblich vereinfacht und verkürzt werden, wenn ein Baustoff mit hinreichend hohem Korrosionswiderstand eingesetzt wird und bekannte Rezepturen als Grundlage genutzt werden. Charakteristisch für das Arbeitsprogramm ist eine Abfolge von klein- zu großmaßstäblichen Versuchen, um eine größere Realitätsnähe zu erzielen und eine Abfolge von kurzfristig durchführbaren zu zeitaufwendigen Untersuchungen, die die in-situ-Bedingungen abbilden.

Einleitung

Die Rahmenbedingungen eines Bergwerks im Salinar und des Endlagerbergbaus erfordert die Entwicklung von Spezialbaustoffen, die als Verfüll- oder Abdichtmaterial Salz enthalten. Im Bereich des klassischen Hoch- und Tiefbaus entwickelte Regelwerke sind zwar für die Entwicklung der Spezialbaustoffe hilfreich, aber nicht uneingeschränkt anwendbar. Demzufolge wurden für die Spezialbaustoffe neue Vorgehensweisen der Baustoffentwicklung bzw. des Mischungsentwurfs hergeleitet. Zwischenzeitlich steht bei der BGE und BGE TECHNOLOGY GmbH für den Endlagerbergbau im Salinar eine breite Palette an Rezepturen zur Verfügung, die als Verfüll- oder Abdichtmaterial eingesetzt

werden kann und es wurden umfangreiche Erfahrungen während ihrer Entwicklung und ihres Routineeinsatzes gewonnen. Hierzu zählen vor allem Salzbetone und Sorelbau-
stoffe. Ziel der Präsentation ist Grundlagen der Baustoffentwicklung von Verfüll- und Ab-
dichtmaterialien im Salinar zu beschreiben und dabei die Besonderheiten hervorzuhe-
ben.

Ziele der Baustoffentwicklung

Eine Baustoffentwicklung oder ein Mischungsentwurf hat zum Ziel eine Baustoffrezeptur zu entwickeln, die spezifizierte Anforderungen erfüllt. Es werden Festlegungen zur Art der Ausgangsstoffe und zur Mischungszusammensetzung (Massenanteile der Komponenten) getroffen. Die Verarbeitung, d.h. das Mischen, Pumpen und Fördern in Rohrlei-
tungen kann Eigenschaften eines Baustoffs beeinflussen. Im Vergleich zu klassischen Normalbetone werden Verfüllmaterialien nach dem Einbringen nicht verdichtet. Dem-
nach sind ggf. auch Vorgaben zur Verarbeitung der Materialien zu treffen. Beim Arbeits-
programm zur Entwicklung eines Baustoffs werden Materialeigenschaften bestimmt und die Messbefunde mit Anforderungen verglichen. Eine Baustoffentwicklung kann als eine spezielle Art einer Produktentwicklung angesehen werden.

Zudem können Daten zu Eigenschaften gewonnen werden, an die zwar keine Anforder-
ungen bestehen, deren Kenntnis jedoch für weitere Auswertungen erforderlich sind. Aus
den Messergebnissen können Abhängigkeiten der Eigenschaften von der Materialzu-
sammensetzung gewonnen und Korrelationen von Eigenschaften hergeleitet werden.
Diese Datensätze helfen ein gutes Verständnis des Baustoffverhaltens zu gewinnen und
können beim Erstellen von Ausschreibungsunterlagen und für die Planung von Quali-
tätssicherungsmaßnahmen genutzt werden. Häufig können Anforderungen an einen
Baustoff nicht direkt geprüft werden. In diesem Fall sind Prüfmethode festzulegen oder
zu entwickeln und Prüfkriterien (Grenzwerte) herzuleiten, die es erlauben die Konformität
mit der Anforderung zu bewerten.

Das Arbeitsprogramm zur Entwicklung eines Baustoffs

Komponenten eines Baustoffs sind ein Bindemittel und eine Anmischlösung sowie bei Mörteln oder Betonen die Gesteinskörnung. Darüber hinaus beeinflussen Zusatzstoffe (inert oder reaktiv) und Zusatzmittel die Eigenschaften eines Baustoffs (vgl. DIN EN 206, VDZ 2014). Zu Beginn des Arbeitsprogramms sind die Ausgangsstoffe des Baustoffs auszuwählen und damit eine Entscheidung über das Baustoffsystem zu treffen. Dabei hat es sich gezeigt, bevorzugt Ausgangsstoffe des Bauwesens zu verwenden, z.B. aufgrund ihrer guten Verfügbarkeit und der bereits bestehenden Qualitätssicherung.

Ein im Endlager eingebrachter Baustoff kann mit Gasen und Lösungen reagieren, wodurch sich die Eigenschaften des Baustoffs verändern. Bei einer Korrosion ist zu befürchten, dass Anforderungen an den Baukörper und den Baustoff dauerhaft nicht gewährleistet werden können. Demzufolge sollte ein Baustoffsystem genutzt werden, das über die geforderte Zeitdauer seine Funktion erfüllen kann. Diese Auswahl kann auf der Basis von Kenntnissen bekannter Baustoffe erfolgen, zumal jeder Baustofftyp charakteristische Eigenschaften aufweist. Hilfreich ist die Grundlagen des Baustoff-Familienkonzepts zu nutzen.

Grobe Partikel können nicht in kleine Hohlräume eindringen, jedoch erlaubt es grobe Gesteinskörnung bei Gewährleistung der Fließfähigkeit Rezepturen mit reduziertem Bindemittelanteil zu entwickeln und damit relativ geringer Wärmeentwicklung beim Erhärten. Aufgrund dieses Sachverhalts sind Verfüll- und Abdichtmaterialien Betone, wobei sich in den meisten Fällen der Einsatz von gebrochenem Steinsalz anbietet, um eine Haltsättigung der Baustofflösung zu erzielen.

Im nächsten Arbeitsschritt sind ersten Festlegungen zu den Mengenanteilen der Ausgangsstoffe zu treffen. Eine Fließfähigkeit erfordert einen Mindestabstand der Gesteinskörnung, so dass das Volumen der Feinkornsuspension größer sein muss als der Porenraum einer Schüttung der Gesteinskörnung. Die bisherigen Baustoffentwicklungen bieten den großen Vorteil, dass mit den dabei gewonnenen Kenntnissen Eigenschaften zahlreicher Rezepturen gut prognostiziert werden können. Sofern erste Testmischungen festgelegt wurden, können wichtige Eigenschaften wie die Wärme- und Temperaturentwicklung beim Erhärten abgeschätzt und mit den Anforderungen verglichen werden.

Grundlage des Erhärtens von Sorelbaustoffen ist die Reaktion von Magnesiumoxid oder Magnesiumhydroxid mit Magnesiumchloridlösungen. Es wird Wasser und gelöstes Magnesiumchlorid der Anmischlösung gebunden. Demnach ist die Anmischlösung ein Teil des Bindemittelsystems. Das Verhalten der Sorelbaustoffe wird nicht nur durch das Mengenverhältnis von Bindemittel zu Anmischlösung bestimmt, sondern auch von der Zusammensetzung der Anmischlösung. Diese Abhängigkeit kann genutzt werden die Eigenschaften des Baustoffs zu steuern. Dies ist ein charakteristischer Unterschied zu Salzbetonen, bei denen Zement und ggf. reaktive Zusatzstoffe mit einer nahezu reinen Natriumchloridlösung reagieren. Die Kapazität der Hydratationsprodukte Wasser zu binden ist relativ gering, so dass der Wasser-Zement-Wert kaum die Hydratationsprodukte, sondern das Porenvolumen beeinflusst.

Allgemein sind bei Verfüll- und Abdichtmaterialien für die Eigenschaften des Baustoffs relevante Eigenschaften der Ausgangsstoffe zu untersuchen sowie rheologische, thermische und Festmaterialeigenschaften, die in mechanische und hydraulische Eigenschaften gegliedert werden können. Weiterer Untersuchungsbedarf kann aus dem Arbeitsschutz, dem Gewässerschutz und dem Strahlenschutz resultieren. In der Regel beginnen die praktischen Arbeiten mit der Bestimmung rheologischer Parameter, weil Frischmaterialeigenschaften schnell ermittelt werden können.

Eine schnelle Durchführbarkeit ist vor allem gewährleistet, wenn geringe Baustoffmengen geprüft werden. So können im Labor viele Prüfungen bei geringem Kosten- und Zeitaufwand erfolgen. Die Eigenschaften eines Baustoffs wird jedoch durch Maßstabs- effekte und Einflussgrößen beim Transport und beim Erhärten beeinflusst. Hierzu zählen beispielsweise ein Nachschereffekt (Nachmischeffekt) bei einem Rohrleitungstransport, ein Verlust von Luftporen oder Baustofflösung (Drainagelösung). Die Temperatur eines Baustoffs beim Erhärten wird vom Volumen und vom Verhältnis des Volumens zur Oberfläche beeinflusst. Um diese Effekte zu berücksichtigen, folgen bei einem Arbeitsprogramm auf den Laborprüfungen, Technikums- und in-situ-Untersuchungen. Diese Abfolge kann mit einer Modifizierung von Prüfverfahren und Anpassungen der Prüfkriterien gekoppelt sein.

Als Anforderung wird im Bereich der Baustofftechnologie ein Grenzwert zu einer Eigenschaft mit der Angabe eines Prüf-/Testverfahrens verstanden, während ein Prüfkriterium eine abgeleitete Größe ist. Eine Anforderung kann zum Beispiel ein Druckverlust beim Rohrleitungstransport sein und die Konformität kann mit Hilfe des Setzfließmaßes und dem Ausbreitmaß als Prüfkriterium bewertet werden. Bei der Baustoffentwicklung wird

nachfolgend für die Gesamtheit der Anforderungen und Prüfkriterien die Konformität bewertet. Diese Vorgehensweise kann graphisch verdeutlicht werden. So zeigt das linke Diagramm der Abb. 1 vereinfachte Konformitätsbereiche von Eigenschaften in Abhängigkeit des Zusatzstoff-Zement-Verhältnisses und dem Wasser-Zement-Wert (vgl. Engelhardt et al. 2015, 2018). Nach dem Eintrag sämtlicher Konformitätsbereiche verbleibt das weiße Feld des rechten Diagramms, in das unter Berücksichtigung von Eigenschaftsschwankungen der Punkt einer Referenzrezeptur eingetragen werden kann.

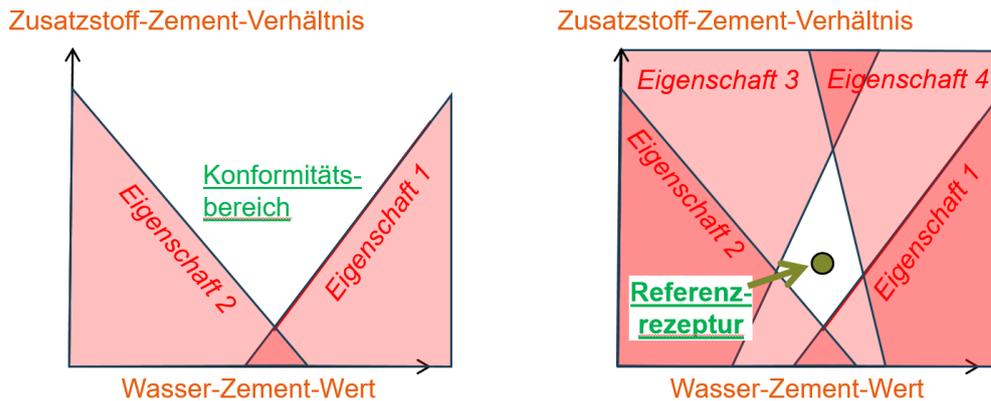


Abb. 1 Entwicklung einer Referenzrezeptur auf der Grundlage von Konformitätsbereichen zu Anforderungen und Prüfkriterien

Weitere Hinweise zum Mischungsentwurf klassischer Baustoffe, die teilweise für die Entwicklung von Verfüll- und Abdichtmaterialien im Salinar genutzt werden können, finden sich bei EFFC/DFI (2018), Huß (2012), IZB (2017), Neville & Brooks (2010), Ozawa et al. (1992), Sedran et al. (1996) und VDZ (2008).

Literatur

DIN EN 206:2021-06. Beton – Festlegung, Eigenschaften, Herstellung und Konformität; Deutsche Fassung EN 206:2013+A2:2021.

Engelhardt, H.-J.; Haverkamp, B.; von Borstel, L.E.; Van Marcke, Ph. & Coppens, E. (2015) Development of a Backfill Material for LILW and HLW Disposal Galleries in the current Belgian Geological Disposal Concept – 15374. Proc. WM2015 Conference, March 15–19, 2015, Phoenix, USA.

Engelhardt, H.-J.; Haverkamp, B. & Raymaekers, D. (2018) Backfilling of Geological Disposal Facilities – Development of Optimized Backfill Material – 18146. Proc. WM2018 Conference, March 18–22, 2018, Phoenix, USA.

EFFC/DFI (2018) Leitfaden Kontraktorbeton für Tiefgründungen. Arbeitsgruppe „Beton“, „European Federation of Foundation Contractors“ (EFFC), Deep Foundation Institute (DFI), 2. Ausgabe, 97 S.

Huß, A. (2012) Mischungsentwurf und Fließigenschaften von Selbstverdichtendem Beton (SVB) vom Mehlkorntyp unter Berücksichtigung der granulometrischen Eigenschaften der Gesteinskörnung. Deutscher Ausschuss für Stahlbeton e.V. (DAfStb), Heft 598, 1. Auflage, Beuth Verlag GmbH.

IZB (2017) Zement-Merkblatt Betontechnik B 20. Zusammensetzung von Normalbeton – Mischungsberechnung. InformationsZentrum Beton GmbH (IZB), 2.2017.

Neville, A.M. & Brooks, J.J. (2010) Concrete Technology. 2nd edition, Pearson Education Ltd., United Kingdom.

Ozawa, K.; Maekawa, K. & Okamura, H. (1992) Development of high performance concrete. Journal of the Faculty of Engineering, The University of Tokyo, Japan, Vol. XLI (3): 381–439.

Sedran, T.; de Larrard, F.; Hourst, F. & Contamines, C. (1996) Mix design of self-compacting concrete (SCC). Proc. Int. RILEM workshop Production Methods and Workability of Concrete, Paisley, Scotland. Edited by Bartos & Marris, E & FN Spon.

VDZ (2014) Zement-Merkblatt Betontechnik B 3. Betonzusätze, Zusatzmittel und Zusatzstoffe. Verein Deutscher Zementwerke e.V., 2.2014.

VDZ (2008) Zement-Taschenbuch. Verein Deutscher Zementwerke e.V. (VDZ, Hrsg.), 51. Ausgabe, Verlag Bau+Technik GmbH, Düsseldorf.

- 1.2** F. Rempel¹, A. Carstensen¹, M. Heidmann-Ruhz¹, K. Herchen¹,
E. Karsten¹, V. Krase¹, L. von Borstel², H-J. Engelhardt², T. Fischer²,
C. Lerch², H. Räuschel² und M. Polster²:

Übersicht über Baustoffuntersuchungen für Stilllegungsverfahren am Beispiel des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM)

¹ *Bundesgesellschaft für Endlagerung (BGE), Peine, Deutschland*

² *BGE Technology GmbH, Peine, Deutschland*

Email: Florian.Rempel@bge.de

Zusammenfassung

Es wurde die Zielstellung von Baustoffuntersuchungen für das Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des ERAM und die zu bedienenden Bedarfe am Beispiel des ERAM vorgestellt. Die benötigten Untersuchungsprogramme sind dabei vielfältig und müssen vielen verschiedenen Aspekten im Rahmen des Planfeststellungsverfahrens gerecht werden. Es wurde skizziert, welche Aspekte u.a. beachtet werden müssen und welche Untersuchungsprogramme sich darauf basierend anschließen. Diese allgemeine Darstellung stellt einen Überblick über die Untersuchungen dar, die im Rahmen des Planfeststellungsverfahrens zur Stilllegung des ERAM benötigt werden. Das Vorgehen und der Untersuchungsumfang können als Orientierung für zukünftige Endlager dienen.

Einleitung

Bei der Endlagerung von radioaktiven Abfällen im Salinargestein werden Baustoffe zur Verfüllung von Hohlräumen sowie für geotechnische Barrieren eingesetzt. Ziel dieser Stilllegungsmaßnahmen ist zum einen das Endlager mechanisch zu stabilisieren, um die Integrität der geologischen Barriere zu erhalten bzw. wiederherzustellen und zum anderen Fluidbewegungen innerhalb der noch verbleibenden Hohlräume zu verhindern bzw. zu begrenzen. Für die Langzeitsicherheitsanalysen ist eine Bewertung der Funktionalität der Stilllegungsmaßnahmen erforderlich, woraus eine Vielzahl unterschiedlichster Untersuchungen an Baustoffen und deren Wechselwirkungen mit dem Wirtsgestein resultieren. In diesem Paper soll ein Überblick über die vielfältigen dafür benötigten Untersuchungen bzw. Untersuchungsprogramme gegeben werden.

Anzumerken ist, dass die für eine Endlagerung notwendigen Baustoffuntersuchungen an den jeweiligen Einsatzzweck und die lokationsspezifischen Gegebenheiten anzupassen sind, z. B. an

- Salzfazien
- Sicherheitskonzept und die abgeleiteten Stilllegungsmaßnahmen (Streckenabdichtungen, Bohrlochabdichtungen, Schachtabdichtungen, Verfüllmaßnahmen)
- Sicherheitsfunktionen der Stilllegungsmaßnahmen (Stützfunktion, hoher hydraulischer Widerstand etc.)
- Baustoffe und Bauwerkskonstruktion
- Features, Events and Processes (FEP)
- Nachweisführung
- Sicherheitsanalysen
- Herstellverfahren und Einbringtechnologie

Eine allgemein gültige, allumfassende Darstellung aller benötigten Untersuchungen ist folglich immer nur für ein spezifisches Endlager möglich, weshalb die Darstellung des State of the Art am Beispiel des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM) erfolgt. Vor dem Hintergrund, dass das ERAM ein ehemaliges Gewinnungsbergwerk ist, ergeben sich besondere Herausforderungen an die Stilllegungsmaßnahmen und demzufolge auch an die einzusetzenden Baustoffe. Zu nennen sind hier beispielsweise die Errichtung von Streckenabdichtungen in unterschiedlichen Fazien (Steinsalz und Hauptanhydrit), bestehende Streckenquerschnitte, Einschränkungen bei den Streckenabdichtungslängen, bereits vollzogene Versatzmaßnahmen mit Salzgrus und Salzbeton, eingeschränkte Zugänglichkeit in einigen Grubenbereichen, ein großes zu verfüllendes Hohlraumvolumen, eine komplexe Geologie des Salzstocks oder vorhandene Lösungszutritte, deren Lösungszusammensetzung und Lösungsmenge schwierig zu prognostizieren sind. Dadurch sind unterschiedliche Baustoffe für die jeweiligen Stilllegungsmaßnahmen zu untersuchen und eine große Bandbreite an Einwirkungen und Prozessen zu berücksichtigen.

Der Fokus liegt im Nachfolgenden auf der Einteilung in die Untersuchungsarten chemisch, hydraulisch, mechanisch und thermisch (CHMT), da diese Einteilung eine hohe Abdeckung aller benötigten Untersuchungen ermöglicht. Gleichzeitig sind jedoch noch

weitere Aspekte zu betrachten, die über diese Einteilung nicht abgebildet werden können wie z. B.:

- Die Auswahl und Entwicklung von robusten und in der erwarteten Entwicklung stabilen Baustoffen, die technisch sicher bei der Umsetzung der Stilllegungsmaßnahmen einsetzbar sind.
- Die zeitliche Entwicklung, siehe Abb. 1. Bei der Baustoffherstellung sind Untersuchungen zu den rheologischen Frischbetoneigenschaften bezüglich Anmischverhalten und Förderbarkeit des Baustoffs mit einem entsprechenden Qualitätssicherungsprogramm wesentlich. Während des Hydratationsprozesses sind die Wärmeentwicklung und daraus resultierende Spannungs- und Verformungsänderungen zu betrachten. Nach der Aushärtung stehen die Festbetoneigenschaften im Fokus, die sich in aufgrund von Einwirkungen und Prozessen (FEP) im Laufe der Zeit weiter verändern können. Diese Veränderungen der Baustoffeigenschaften stellen für die Untersuchungen eine besondere Herausforderung dar. Daher empfiehlt es sich, Untersuchungen während sich die Baustoffe verändern, möglichst zu vermeiden, z. B. durch die Wahl eines Baustoffs der korrosionsbeständig ist und unkritisches Hydratationsverhalten aufweist (mögliche Schädigungsentwicklung).

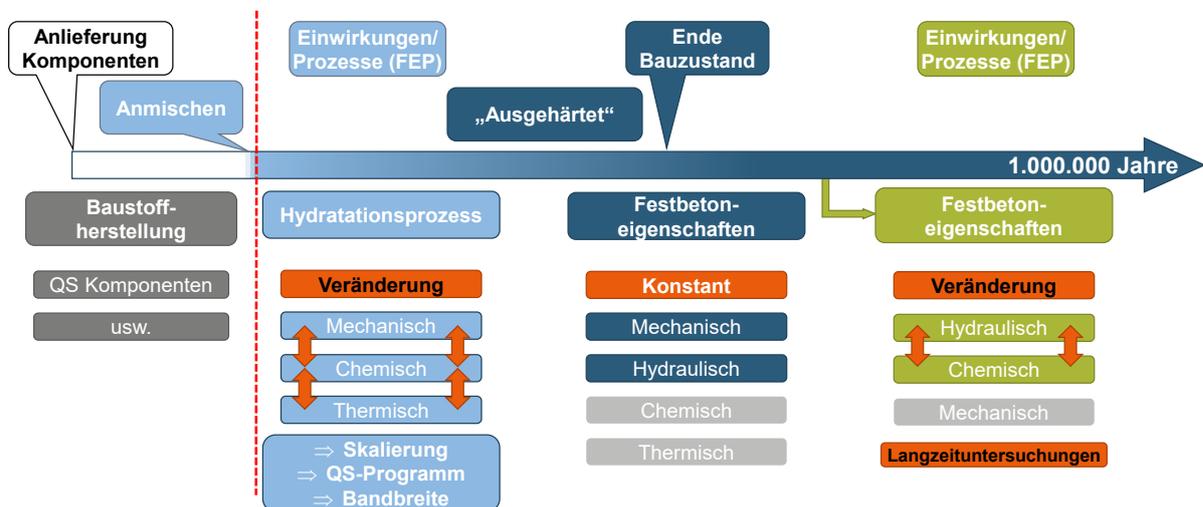


Abb. 1 Überblick über die für die Untersuchungen relevante zeitliche Entwicklung

Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM)

Zur Gewährleistung der Sicherheit für die Nachverschlussphase hat das Sicherheitskonzept des ERAM das Ziel, die Abfälle und eingebrachten Stoffe am Ort ihrer Einlagerung

zu konzentrieren und sicher einzuschließen. Um das Ziel des sicheren Einschlusses bestmöglich zu erreichen, werden Bereiche mit Einschlusswirkung (BmEw) definiert. Hieraus leiten sich die zu realisierenden Stilllegungsmaßnahmen ab.

Die bestehenden Hohlräume des Grubengebäudes des ERAM werden weitgehend mit einem fließfähigen Salzbeton und Magnesiabaustoff verfüllt. Durch diese Verfüllmaßnahmen werden u. a. Lasten, die aus dem Gebirgsdruck resultieren, in das Gebirge abgeleitet. Zusätzlich werden Senkungen der Tagesoberfläche und Umlösungen potenziell zutretender Salzlösungen mit dem Gebirge begrenzt. Darüber hinaus werden die Standicherheit des Grubengebäudes und der Zustand der geologischen Barriere erhalten bzw. verbessert.

Des Weiteren werden zur Abgrenzung der BmEW an geeigneten Lokationen in den Strecken geotechnische Barrieren errichtet. Der Bau dieser Streckenabdichtungen ist aus einem Magnesiabaustoff (MgO-Baustoff: Massenbaustoff und Spritzbeton), teilweise in Kombination mit Bitumen vorgesehen. Für die Verfüllung von Bohrlöchern soll ein ähnlicher, auf Bohrlochverfüllungen angepasster MgO-Baustoff zum Einsatz kommen.

Um die Erstellung der Unterlagen für das Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des ERAM zu beschleunigen, werden die Arbeiten parallelisiert. D. h. Arbeiten wie z. B. Sicherheitsanalysen und Nachweisführung werden parallel zu den Untersuchungen durchgeführt. Diese Parallelisierung bringt eine deutliche Verkürzung des Verfahrens, erzeugt jedoch zusätzlichen Aufwand, um die Arbeiten zu koordinieren. Für die Baustoffuntersuchungen bedeutet dies, dass zu Beginn des Verfahrens noch nicht alle Bedarfe bestimmt werden können, so dass entsprechende Flexibilität bei den Untersuchungen/Untersuchungsprogrammen benötigt wird.

Untersuchungsprogramme

Wie oben dargestellt, werden die Untersuchungen in

- hydraulische Untersuchungen,
- mechanische Untersuchungen,
- thermische Untersuchungen und
- chemische Untersuchungen eingeteilt betrachtet.

Diese Einteilung wird für die Festlegung der Untersuchungsprogramme für das Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des ERAM zu Grunde gelegt und hat den Vorteil, dass die Untersuchungen in den Untersuchungsprogrammen jeweils nach Kompetenzen bzw. Arbeitsgebieten gebündelt durchgeführt werden können.

Mechanische Untersuchungen

Ein wesentliches Ziel der mechanischen Untersuchungen ist es, die für die mechanischen Bewertungen benötigten Parameter bereitzustellen, aber auch die Grundlage für eine Datenbasis der Sicherheitsspezifikationen der Stilllegungsmaßnahmen zu schaffen.

Für die Bewertung der mechanischen Eigenschaften muss das Spannungs-Verformungsverhalten der beteiligten Materialien – Baustoffe und Wirtsgestein(e) – passend zu den erwarteten Spannungs-Verformungszuständen ermittelt werden. Da dieses von vielen verschiedenen Faktoren abhängt, wird eine Vielzahl an verschiedenen Untersuchungen benötigt, um die einzelnen Abhängigkeiten aufschlüsseln zu können, siehe Abb. 2.

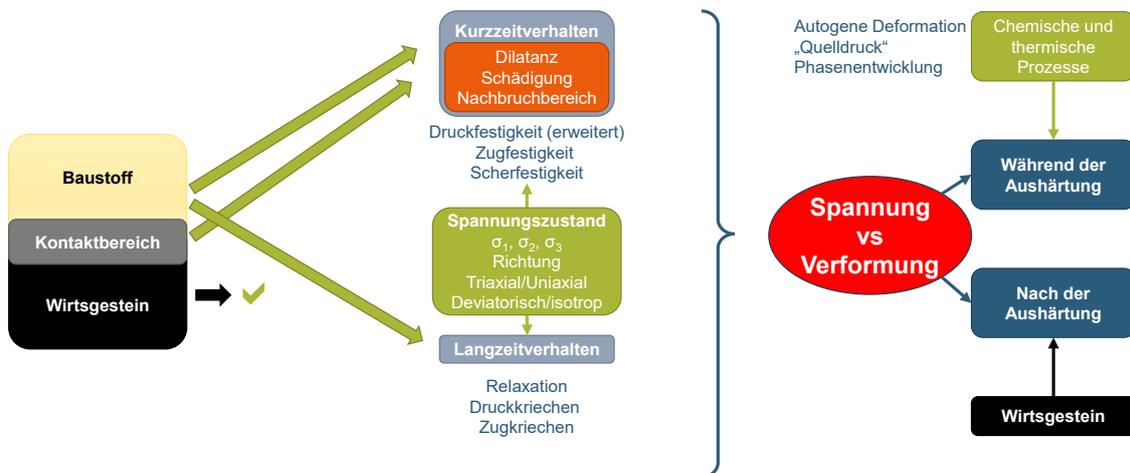


Abb. 2 Überblick über die Abhängigkeiten der mechanischen Untersuchungen

Im Allgemeinen werden die Untersuchungen eingeteilt hinsichtlich des Kurz- und Langzeitverhaltens der Materialien. Beim Kurzzeitverhalten liegen die benötigten Untersuchungszeiten innerhalb von Stunden bis Tagen, so dass das Kurzzeitverhalten (z. B. Festigkeitseigenschaften wie Druck/Schub-, Zug- oder Dilatanzfestigkeit, elastische Eigenschaften) direkt im Labor untersucht wird.

Die für das Kurzzeitverhalten verwendeten Verformungsraten liegen üblicherweise im Bereich von 10^{-5} bis 10^{-7} 1/s. Die in situ vorliegenden Verformungsraten (ERAM 10^{-10} bis 10^{-13} 1/s) sind im Allgemeinen um Größenordnungen geringer, so dass im Labor keine vollständigen Spannungs-Verformungskurven innerhalb von den zur Verfügung stehenden Zeiträumen ermittelt werden können. Das Langzeitverhalten wird aus Kriech- und Relaxationsuntersuchungen sowie der Übertragung der Ergebnisse aus dem Kurzzeitverhalten auf die geringen In-situ-Verformungsraten ermittelt.

Bei allen diesen Untersuchungen ist der dreidimensionale Spannungszustand zu berücksichtigen. Die Vielzahl der Untersuchungsmethoden und insbesondere die Dauer der Langzeituntersuchungen führt mit dem dreidimensionalen Spannungszustand bei dem sowohl Druck/Schub- als auch Zugspannungen betrachtet werden müssen, zu einer so großen Anzahl an Untersuchungen, dass eine Reduzierung auf eine ausreichende Anzahl an Untersuchungen essentiell ist. Hierzu beschränken sich die Untersuchungen auf radialsymmetrische Untersuchungen und den Sonderfall von einaxialen Untersuchungen, die experimentell nochmals einfacher sind und so detailliertere Untersuchungen des Sonderfalls erlauben. Zur weiteren Vereinfachung werden die Untersuchungen im Allgemeinen in Untersuchungen unter isotroper Belastung, bei denen alle drei Hauptspannungskomponenten gleich groß sind und in Untersuchungen unter einem deviatorischen Spannungszustand, mit unterschiedlich großen Spannungskomponenten, eingeteilt.

Hydraulische Untersuchungen

Die hydraulischen Untersuchungen zielen darauf ab, Daten bereitzustellen, mit denen der hydraulische Widerstand eines Abdichtsegmentes bzw. -bauwerks ermittelt werden kann. Hierzu sind Untersuchungen am Baustoff und Kontaktbereich notwendig, wobei die Herausforderungen in der Reduzierung von Störfaktoren und der Übertragung der Laborergebnisse auf In-situ-Verhältnisse zu sehen sind.

An Abhängigkeiten gibt es grundsätzlich einen mechanischen Einfluss durch die effektive Einspannung (Differenz zwischen mechanischer Spannung und lokalem Porendruck), doch ist dieser im elastischen Bereich aufgrund der minimalen Verformungen als gering anzunehmen. Sobald plastische Verformungen auftreten oder der Fluiddruck die mechanische Einspannung überschreitet (Fluiddruckkriterium), kann sich die Permeabilität deutlich erhöhen. Eine weitere Abhängigkeit ist das strömende Fluid. Hier sollten Untersuchungen sowohl mit Gas als auch Lösung durchgeführt werden.

Die große Herausforderung bei den hydraulischen Untersuchungen und damit oft der überwiegende Teil des Untersuchungsaufwandes liegen in der Konditionierung, der Einordnung der gemessenen Werte und der Minimierung von Störfaktoren. Ziel der Konditionierung ist es, Prüfkörper in einen definierten Ausgangszustand zu bringen. Auf diese Weise wird der Zustand nach Herstellung ermittelt, z. B. Sättigung und gleichzeitig die Prüfkörper in den Startzustand für diverse Untersuchungen überführt, z. B. Permeabilität, Porosität. Die Konditionierung besteht entweder aus einer Trocknung oder Aufsättigung.

Die Trocknung ist so durchzuführen, dass keine Schädigung, z. B. Zerstörung von Hydratphasen stattfindet, sie aber gleichzeitig möglichst vollständig ist. Zusätzlich ist die Trocknung aufgrund der langen Zeiträume von Monaten bis Jahren im Allgemeinen zeitkritisch und daher auch im Hinblick auf die Geschwindigkeit zu optimieren. Für diese Optimierung sind z. B. verschiedener Trocknungsmethoden zu vergleichen und zu bewerten. Wesentlich ist außerdem, dass es bei salzhaltigen Baustoffen zwangsläufig zu Ausfällungen kommt, die den Porenraum reduzieren, was entsprechend zu berücksichtigen ist.

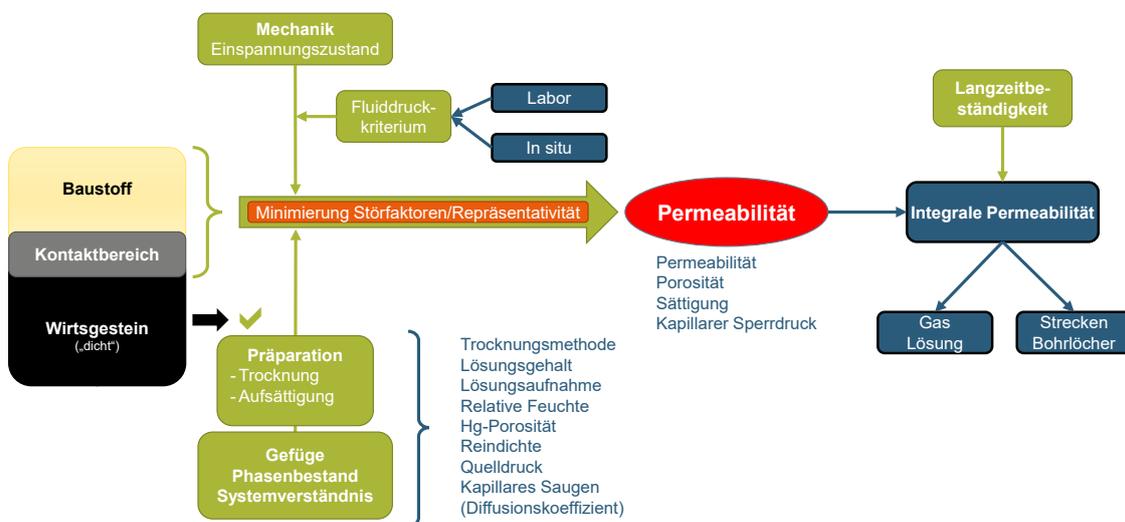


Abb. 3 Überblick über die hydraulischen Untersuchungen

Bei der Aufsättigung wird der Porenraum des Baustoffs vollständig mit einem Fluid, i. d. R. einer Lösung gefüllt. Die Herausforderungen liegen darin, eine möglichst vollständige Aufsättigung zu erreichen (Entfernung der Luft aus den Poren) und die Interaktionen zwischen Lösung und Material zunächst zu minimieren. Hierzu sollte eine Lösungszusammensetzung ermittelt werden, die mit dem Baustoff möglichst gut im Gleichgewicht steht. Diese Lösung sollte auch zur Ermittlung der intrinsischen Lösungspermeabilität

verwendet werden. Dies ist die Anfangspermeabilität des Baustoffs bei Lösungskontakt. Je nach Baustoff und Lösungen sind zusätzliche Untersuchungen mit anderen Lösungen abzuwägen.

Thermische Untersuchungen

Die Aushärtung von zementbasierten Baustoffen ist im Allgemeinen exotherm und damit begleitet von einer Ausdehnungsphase gefolgt von einem anschließenden Zusammenziehen, welches von chemischen Volumenänderungen durch die Hydratation überlagert wird. Zur Beurteilung der Auswirkungen des Hydratationsprozesses hinsichtlich einer möglichen Schädigungsentwicklung sind

- die Wärmeentwicklung,
- die spezifische Wärmekapazität,
- die Wärmeleitfähigkeit und
- der Wärmeausdehnungskoeffizient zu ermitteln.

Wesentlich für Prognose der zukünftigen Entwicklung ist dabei der Endzustand nach der Aushärtung, da dies der Startzustand für die Prognosen ist.

Chemische Untersuchungen

Die Ergebnisse von chemischen Untersuchungen wie z. B. Phasenbestand, gehen i. d. R. nicht als Parameter in mechanische oder hydraulische Simulationen oder Sicherheitsanalysen ein. Chemische Untersuchungen dienen daher primär der Qualitätssicherung sowohl von Baustoffkomponenten als auch des ausgehärteten Baustoffs und dem Systemverständnis, z. B. bei Wechselwirkungen mit Fluiden oder der Langzeitstabilität.

- 1.3** H.-J. Engelhardt¹, R. Wendling¹, F. Rempel², A. Carstensen²,
M. Heidmann-Ruhz², L. von Borstel¹ und H. Räuschel¹:

Qualitätssicherung von Baustoffen

¹ *BGE TECHNOLOGY GmbH, Peine, Deutschland*

² *Bundesgesellschaft für Endlagerung (BGE), Peine, Deutschland*

Email: Joachim.Engelhardt@bge.de

Zusammenfassung

Basierend auf den Regelwerken des Hoch- und Tiefbaus wurden unter Berücksichtigung der Baustoffcharakteristika und der besonderen Rahmenbedingungen Qualitätssicherungsprogramme für den Einsatz im Endlagerbergbau im Salinar entwickelt. Der Routinebetrieb zeigt die erfolgreiche Anwendung bei Verfüllmaßnahmen und dem Erstellen hydraulischer Abdichtungen. Somit wurde ein wesentlicher Grundstein für die erfolgreiche Durchführung zukünftiger Verfüll- und Abdichtmaßnahmen geschaffen, wie die Stilllegungsmaßnahmen des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben.

Einleitung

An die Eigenschaften von Baustoffen und ihrer Ausgangsstoffe bestehen Anforderungen, damit ein Bauwerk die geforderte Funktion erfüllen kann. Technische und menschliche Fehler können jedoch zu Abweichungen von den Sollwerten führen. Mit dem Ziel die Konformität mit den Anforderungen zu gewährleisten, sind daher Qualitätssicherungsmaßnahmen durchzuführen. Hierfür wurden für den Hoch- und Tiefbau Regelwerke (z.B. DIN EN 206, vgl. Helm & Zeh 2007) entwickelt. Im Endlagerbaubau im Salinar werden meist salzhaltige Baustoffe eingesetzt. Materialien werden bevorzugt rohrleitungsgebunden transportiert und die „Baustellen“ sind nur eingeschränkt zugänglich. Zudem sind Anforderungen zu prüfen, die aus dem Bergbaueinsatz resultieren. Dies erfordert eine Anpassung der Methoden der Qualitätssicherung. Ziel der Präsentation ist Grundlagen der Qualitätssicherung, Rahmenbedingungen des Endlagerbergbaus im Salinar und Charakteristika der Qualitätssicherung zu beschreiben. Der Fokus ist die Qualitätssicherung von Verfüll- und Abdichtmaterialien. Die Beispiele der bergbaulichen Gefahrenabwehrmaßnahme Zentralteil Morsleben und der Erstellung von Strömungsbarrieren in der Schachanlage Asse II verdeutlichen wesentliche Sachverhalte.

Qualitätssicherung – Ursachen und Ziele

Bestandteile von Mörteln oder Betonen sind Bindemittel, Gesteinskörnung und allgemein eine Anmischlösung. Zur Optimierung von Eigenschaften können Zusatzstoffe und Zusatzmittel verwendet werden. Jeder Arbeitsschritt beim Gewinnen oder der Herstellung inkl. der Lagerung und des Transports beeinflusst die Eigenschaften der Stoffe. Dies trifft im besonderen Maße auf die Endprodukte (Mörtel, Beton) zu, die durch Dosieren und Mischen der Ausgangsstoffe hergestellt werden. Eigenschaften natürlicher Rohstoffe variieren und Geräte der Prozesskette verschleißern. Technische Störungen und menschliche Fehler können nicht ausgeschlossen werden. Demnach ist bei einem Baustoffeinsatz nicht nur eine Variabilität von Eigenschaften zu berücksichtigen, sondern die Möglichkeit, dass Anforderungen nicht eingehalten werden. Qualität ist das Maß, in dem ein Produkt den Anforderungen entspricht. Maßnahmen, die die Anforderungen sicherstellen sollen, werden daher als Qualitätssicherung (QS) bezeichnet.

Mit dem Ziel eine reibungslose und störungsfreie Baustoffproduktion zu gewährleisten, sind als QS alle Abläufe und Tätigkeiten zu beschreiben und zu prüfen, inwiefern sie die Qualität der Produkte beeinflussen. Auf diese Weise können potenziell negative Einflüsse auf die Qualität erkannt und beseitigt werden. Wesentlich für eine erfolgreiche QS ist demnach problematische Prozessschritte frühzeitig zu identifizieren und vorbeugende Maßnahmen anzuwenden. Dies kann auch Änderungen des Prozessablaufs umfassen. Trotz sorgfältigster Umsetzung dieser Maßnahme ist eine ständige Qualitätskontrolle der Geräte und Produkte jedoch unverzichtbar und damit ein fortlaufender Vergleich der Baustoffeigenschaften mit den Anforderungen. Da Anforderungen häufig nicht direkt geprüft werden können, sind Prüfverfahren und Konformitätskriterien zu entwickeln. Ziel muss es sein, Abweichungen möglichst schnell zu erkennen und zu beseitigen, damit qualitativ minderwertiges Material aus dem Produktionsprozess ausgesondert und gegen qualitätskonformes Material ersetzt werden kann.

Die Arbeiten einer QS enden jedoch nicht mit dem erfolgreichen Erstellen eines Bauwerks. Vielmehr sind zum Nachweis des anforderungsgerechten Baustoffeinsatzes sämtliche QS-Arbeiten und Prüfbefunde zu dokumentieren. Dies umfasst auch eine statistische Auswertung der Messresultate (z.B. DIN EN 206, Hartwig & Griguhn 2016, Wälder & Wälder 2013, vgl. Spörel 2015), um die Voraussetzung für die Projektabnahme zu schaffen. Statistische Verfahren sollten zudem bereits während des Produktionsbetriebs

bes genutzt werden, um Produktionsprozesse zu optimieren, d.h. eine statistische Prozesslenkung durchzuführen und sogenannte Qualitätsregelkarten zu entwickeln.

Aufgaben der Qualitätssicherung

Grundsätzlich können organisatorische und technische Aufgaben einer QS unterschieden werden. Zum ersten Bereich zählen das Erstellen eines QS-Plans, der vorgibt was, wie, wann und von wem geprüft wird. Messverfahren und Messzyklen sowie Prüfer bzw. Prüfinstitutionen werden benannt. Unverzichtbar für die QS ist zudem Schulungsmaßnahmen und Meldekettens festzulegen sowie das Vorgehen bei Nicht-Konformität zu beschreiben. Zu den technischen Aufgaben zählen die Überwachung von Tätigkeiten, maschineller Prozesse und die Qualitätskontrolle der Baustoffe. Dies umfasst auch die Kontrolle von Lieferpapieren und extern erstellter QS-Dokumente. Auch ist die Durchführung von Eichungen und von Kalibrierungen zu veranlassen und deren Durchführung zu prüfen.

Ordnet man die Arbeiten den Projektphasen zu, so ist hervorzuheben, dass vor der Baustoffproduktion bereits neben dem Erstellen des QS-Plans Lieferantenbewertungen durchzuführen sind, Bemusterungen von Probematerial und demzufolge Baustoffuntersuchungen im Labor, im Technikum und unter in-situ-Bedingungen. Die Praxis zeigt, dass häufig die Abstimmung von Prüfverfahren mit Lieferanten und externen Prüfinstitutionen einen großen Aufwand erfordert.

Besonderheiten des Endlagerbergbaus im Wirtsgestein Salz

Mit dem Ziel An- und Umlöseerscheinungen des Salinars zu vermeiden, werden im Salzbergbau mit wenigen Ausnahmen salzhaltige Baustoffe eingesetzt, wie Salzbetone und Sorelbaustoffe. Bindemittel der Salzbetone sind Zemente, z.B. nach DIN EN 197-1, Gesteinskörnung und Natriumchloridlösung, die gegen Wasser ausgetauscht werden kann, wenn der Baustoff größere Mengen Halit enthält. Bindemittel der Sorelbaustoffe sind Magnesiumoxid oder Magnesiumhydroxid. Die Baustoffe sind mit Magnesiumchloridlösung herzustellen, damit die Kristallisation von Sorelphasen zum Erhärten führt. Die Baustoffe haben eine korrosive Wirkung auf Geräte, die zur Probearbeitung und Prüfung genutzt werden. In der Regel ist eine starke Hygroskopizität charakteristisch.

Ausgangsstoffe und Baustoffe werden rohrlungsgebunden gefördert, wobei die Förderentfernung mehrere Kilometer betragen kann. Eine Besonderheit des Bergbaus ist

auch der eingeschränkte Zugang zu den „Baustellen“ und die ungünstigen Rahmenbedingungen unter Tage für die Durchführung von Baustoffprüfungen. Darüber hinaus muss eine QS die Konformität mit zahlreichen unüblichen Anforderungen gewährleisten. Als Beispiel für Verfüllmaterialien können genannt werden Anforderungen an die Menge der Blut- und Drainagelösung, die Volumenstabilität beim Erhärten und die Expansion bzw. Kontraktion beim Erwärmen oder Abkühlen. Ein hydraulisches Abdichten setzt ein geringes Kompaktionsvermögen und eine geringe Permeabilität voraus. Zudem sind hydraulisch wirkende Abdichtungen „frisch-in-frisch“ zu betonieren.

Die Prüfergebnisse von Festmaterialeigenschaften liegen erst nach dem Baustoffeinbau vor. Durchzuführen ist daher insbesondere im Bereich des Bergbaus eine vorbeugende QS, wobei die Prüfung von Ausgangsstoffen beim Produzenten oder Lieferanten, bei der Anlieferung und dem Transport eine hohe Priorität hat, ebenso wie die Prüfung von Lieferpapieren, Dosier- und Mischprotokollen. Visuelle Prüfungen der Ausgangs- und Baustoffe und die Untersuchungen von Frischmaterialeigenschaften haben eine hohe Bedeutung. Der Einsatz von „Schnellprüfverfahren“ hat den Vorteil, dass die Prüfergebnisse rechtzeitig vor dem Baustoffeinbau bewertet werden können.

Beim Rohrleitungstransport werden Suspensionen geschert, so dass ein „Nachmischefekt“ auftritt, der die Eigenschaften des Baustoffs beeinflusst. Festmaterialeigenschaften sind darüber hinaus vom Erhärtungsgrad und damit von der Zeit und der Temperatur abhängig. Häufig ist es erforderlich Lagerzeiten von Probekörpern zu begrenzen, um Lagerkapazitäten der Probekörper zu reduzieren und möglichst kurzfristig Aussagen zu den Festmaterialeigenschaften treffen zu können. Diese Sachverhalte führen dazu, dass die Konformität mit Anforderungen häufig nicht direkt bewertet werden kann, sondern eine Bewertung oder Interpretation der Prüfergebnisse erforderlich ist.

Die bergbauliche Gefahrenabwehrmaßnahme Zentralteil Morsleben

Mit dem Ziel den Zentralteil des Grubenfelds Bartensleben zu stabilisieren, wurden von 2003 bis 2011 Abbaukammern mit rund 935.000 m³ Salzbeton verfüllt. Der Hochofenzement wurde mit 1-Kammer-Siloaufliegern direkt vom Zementwerk angeliefert. Beim Salzgrus handelte es sich um Aufbereitungsrückstände eines Kaliwerkes. Der Salzbeton wurde mit einem klassischen Transportbetonwerk hergestellt, das für die Salzbetonproduktion angepasst und mit Becken zur Herstellung von Natriumchloridlösung erweitert wurde. Auf dem Betriebsgelände befanden sich Container zur Lagerung von Probematerial und zur Durchführung von Laborprüfungen. Das Anmischen erfolgte mit einem

Doppelwellen-Chargenmischer. Der Salzbeton gelangte über eine Transferleitung zu einer stationären Förderanlage, die den Salzbeton über ein Rohrleitungssystem nach unter Tage in die Abbaue verpumpte (Abb. 1).



Abb. 1 Transportbetonwerk, Transferleitung und Halle, in der sich die stationäre Förderanlage befand

Verarbeitet wurde feuchter Salzgrus, so dass zur Gewährleistung der Rezepturtreue die Funktion der Feuchtemesssonde zu untersuchen war. Hierzu wurden Proben getrocknet und die Vergleichbarkeit mit Sondenmesswerten geprüft. Die Auswertung ergab, dass die in der Anlage integrierte Mikrowellensonde eingesetzt werden kann. Die Verwendung von feuchtem Salz und Natriumchloridlösung erforderte zudem Änderungen der Steuer- software, die es dann erlaubte Natriumchloridlösung unterschiedlicher Konzentration zu verarbeiten, wobei als Eingabeparameter die Lösungsdichte genutzt wurde. Zum Abschluss des Dosierprozesses und damit nach der Zugabe feuchter Gesteinskörnung wurde stets Wasser dosiert, damit der Gesamtwassergehalt den Rezepturvorgaben entsprach.

QS-Maßnahmen (vgl. Fischer et al. 2004) erfolgten im Transportbetonwerk und nach der Anlieferung zur Förderanlage. Voruntersuchungen ergaben, dass das Setzfließmaß als Konsistenzprüfverfahren am besten geeignet ist Veränderungen des Fließverhaltens zu erfassen (Engelhardt 2012). Die Dichte und der Luftporenanteil des Salzbetons wurden ermittelt, um die Dichte des luftporenfreien Betons zu berechnen und mit Sollwerten zu vergleichen. Hierfür wurden die Dosierprotokolle der Mischanlage elektronisch an die QS-Stelle der Förderanlage übermittelt. Routineprüfungen umfassten ferner Bestimmungen der Drainage- und Blutlösung. Da der Schereinfluss beim Rohrleitungstransport die Menge der Drainage- und Blutlösung beeinflusst, wurde dieser Einfluss durch eine

Mischvorrichtung simuliert. Untersuchungen des Fließwinkels erfolgten von Suspension, die den Vorlagebehältern der Förderanlage entnommen wurden, um den Schereinfluss der Transferleitung mit den integrierten statischen Mixern zu erfassen.

Zur Qualitätskontrolle der Festmaterialeigenschaften wurden Probekörper im Transportbetonwerk hergestellt. Anforderungen bestanden an die Druck- und Zugfestigkeit und den Elastizitätsmodul (E-Modul). Routinemäßig geprüft wurde die Druckfestigkeit. Der E-Modul und die Zugfestigkeit wurden im geringen Ausmaß geprüft, weil Korrelationen belegen, dass die Anforderungen an den E-Modul und die Zugfestigkeit bei Gewährleistung der geforderten Druckfestigkeit ebenso erfüllt sind.

Während der Salzbetonproduktion zeigte sich, dass die Qualitätssicherung von Zement nach der DIN EN 196-Familie ausreichend ist, um Qualitätsschwankungen im hinreichenden Ausmaß zu begrenzen. Variationen der Korngröße und damit des Wasseranspruchs der Flugasche (DIN EN 450-1, DIN EN 450-2) veränderten jedoch das Fließverhalten des Salzbetons, so dass häufige Korrekturen des Lösungsgehaltes erforderlich waren. Dies führte zur Entwicklung des Salzbetons M4, der an Stelle von Steinkohlenflugasche Kalksteinmehl enthält. Zudem wurde ein Teil des Salzes gegen silikatischen Sand ersetzt.

Bau von Strömungsbarrieren in der Schachtanlage Asse II

Die Schachtanlage Asse II ist ein ehemaliger Gewinnungsbetrieb in dem schwach- und mittelradioaktive Abfälle eingelagert wurden. Aufgrund der gebirgsmechanischen Schädigung des Gebirges, die zu einem Zutritt von Lösung aus dem Deckgebirge führte, ist die Rückholung der radioaktiven Abfälle seit 2013 ein gesetzlicher Auftrag. Da eine Eskalation des Lösungszutritts nicht ausgeschlossen werden kann, werden Verfüll- und Abdichtmaßnahmen zur Notfallvorsorge umgesetzt. Hierzu zählt der Bau sogenannter Strömungsbarrieren (SB) aus Sorelbeton A1 (z.B. Engelhardt 2021, Köhler et al. 2019, Teichmann et al. 2017). Die zum Bau erforderlichen Prozessabläufe (vgl. Abb. 2) umfassen umfangreiche QS-Maßnahmen.

Eine Vorgabe zur Lokalität und zum hydraulischen Mindestwiderstand der SB bilden die Anforderung an die Bauplanung und –ausführung. Die Bauplanung beginnt mit einer Baugrunduntersuchung, die geotechnische Messungen und eine geologische Aufnahme umfasst. Bohrungen im Bereich der SB werden qualitätsgerecht verfüllt. Aus den geotechnischen Messungen erfolgt eine Auslegungsrechnung, bei der auf Grundlage der

hydraulischen Anforderungen die Bauwerksgeometrie abgeleitet wird. In einem weiteren Schritt wird ein Bautechnischer Nachweis (BTN) erstellt. In diesem wird gezeigt, dass die Anforderung des hydraulischen Widerstands am jeweiligen Standort erreicht werden kann. Zusätzlich belegt der BTN, dass die in den Modellierungen getroffenen Annahmen, z.B. Materialverhalten, Einfluss von Bohrungen, tatsächlich eingehalten werden können. Der BTN liefert die Grundlage zur Erstellung eines standortspezifischen Qualitätssicherungs- (QS) und Dokumentationsplans. Auf Basis des QS- und Dokumentationsplans wird ein Bauablauf erstellt, der die durchzuführenden Arbeiten auflistet. Nach Vorlage der behördlichen Genehmigung wird mit dem Bau der SB begonnen. Dazu wird der Standort inklusive des Nachschnitts vorbereitet und es erfolgt eine technische Abnahme und geologische Aufnahme des Standorts. Erfüllt die Abnahme die standortspezifischen Anforderungen, können die Arbeiten durchgeführt werden, ansonsten sind zusätzliche Arbeiten nötig und der Standort wird erneut geprüft.

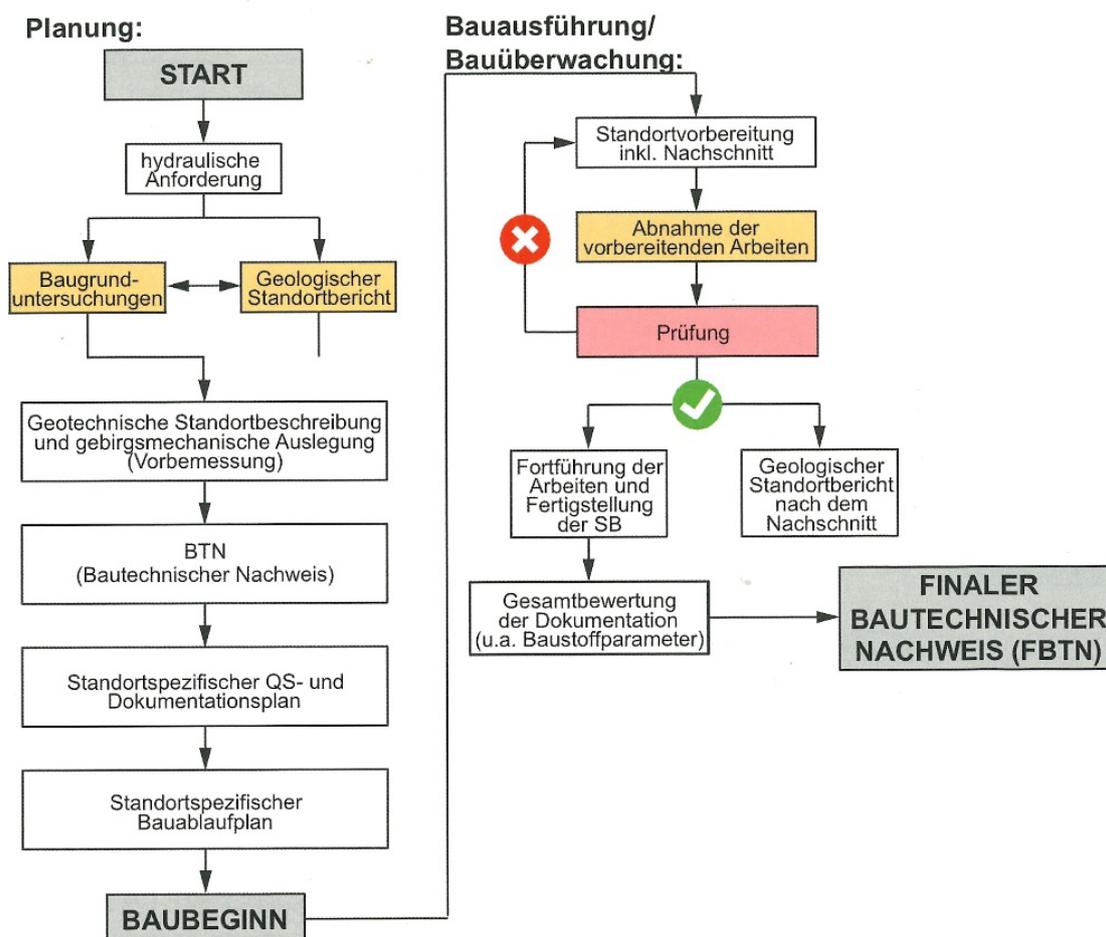


Abb. 2 Prozessabläufe zur Erstellung einer Strömungsbarriere in der Schachttanlage Asse II (Köhler et al. 2019)

Die Funktionalität der SB wird auf Basis der Ergebnisse der QS-Prüfungen, der Bauüberwachung und bei Bedarf ergänzender geotechnischer Messungen in einem finalen bautechnischen Nachweis belegt. Auf Grundlage von Normen wurden hierfür speziell angepasste Baustoffprüfungen zur Bestimmung relevanter Parameter entwickelt. Zur Sicherstellung der Baustoffqualität erfolgen Eingangskontrollen der Baustoffkomponenten, Rezepturprüfungen, Überwachung von Suspensionsparametern (Temperatur, Luftporengehalt, Fließmaß, Suspensionsdichte) und Untersuchungen an Probekörpern (Permeabilität, Ersatzkompaktionsmodul, einaxiale Druckfestigkeit).

Die Komponenten zur Herstellung des Sorelbetons werden angeliefert (MgO, MgCl₂-dominierte Lösung, Steinsalz), jedoch können beim Einsatz von Sorelbeton als Verfüllmaterial auch Komponenten aus dem eigenen Betrieb (gebrochenes Steinsalz, gefasste MgCl₂-dominierte Lösung) verwendet werden. Der Maschinenpark erlaubt die Herstellung der Trockenmischung (Vorprodukt aus Steinsalz und MgO) in stationären Baustoffanlagen (BA) sowohl über als auch unter Tage. Das Anmischen der Suspension erfolgt in semimobilen BA im Nahbereich des zu verfüllenden Bereichs. Zur Qualitätskontrolle der Komponenten und Produkten ist ein Überwachungsprogramm eingerichtet worden. An mehreren Punkten erfolgt eine mineralogische, chemische und physikalische Charakterisierung der Komponenten, so dass eine qualitätsgerechte Herstellung der Bauwerke garantiert werden kann. Abb. 3 gibt einen Überblick.

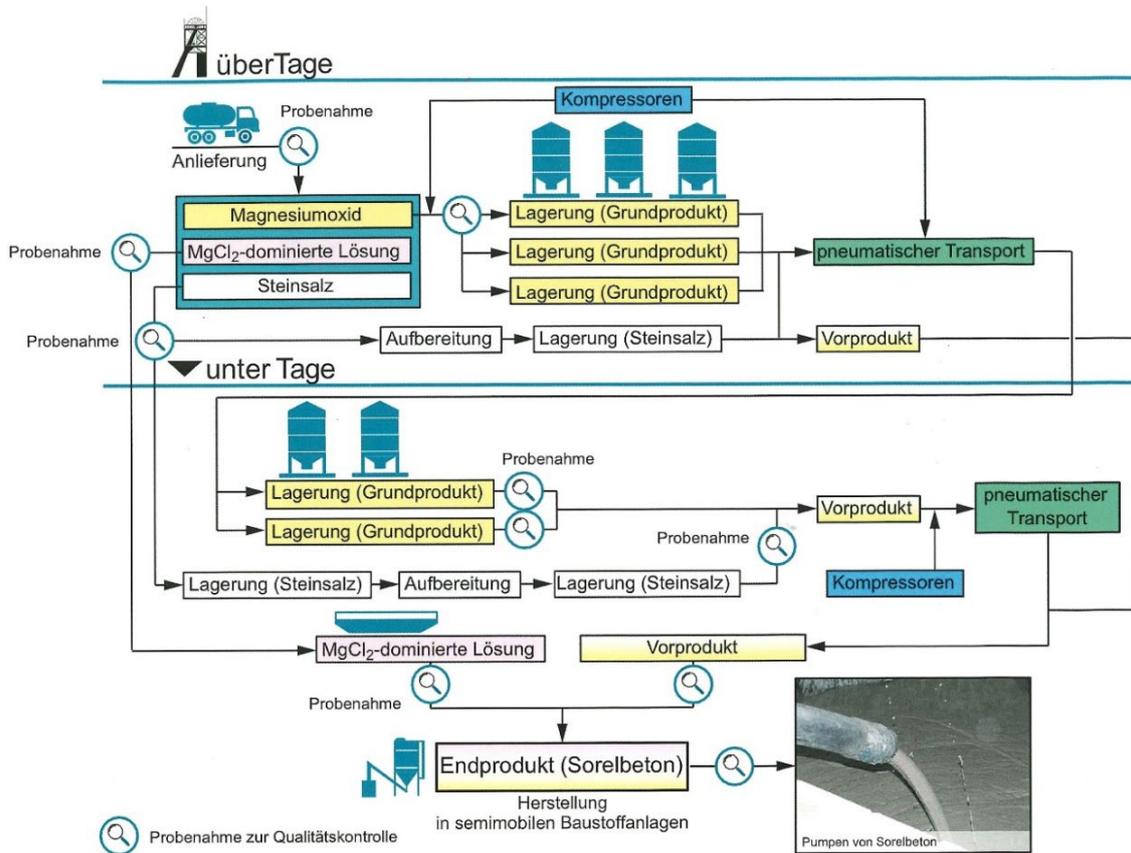


Abb. 3 Produktion und Materiallogistik zur Herstellung von Sorelbeton A1 (Köhler et al. 2019)

Literatur

DIN EN 197-1:2011-11. Zement – Teil 1: Zusammensetzung, Anforderungen und Konformitätskriterien von Normalzement; Deutsche Fassung EN 197-1:2011.

DIN EN 206:2021-06. Beton – Festlegung, Eigenschaften, Herstellung und Konformität; Deutsche Fassung EN 206:2013+A2:2021.

DIN EN 450-1:2012-10. Flugasche für Beton – Teil 1: Definition, Anforderungen und Konformitätskriterien; Deutsche Fassung EN 450-1:2012.

DIN EN 450-2:2005-05. Flugasche für Beton – Teil 2: Konformitätsbewertung; Deutsche Fassung EN 450-2:2005.

Engelhardt, H.-J. (2012) Entwicklung eines Konsistenzprüfverfahrens zur Qualitätssicherung von Salzbeton. 21. Kolloquium und Workshop Rheologische Messungen an mineralischen Baustoffen, Hochschule Regensburg, 29.2.2012.

Engelhardt, H.-J.; Teichmann, L. & Adelt, J. (2021) Drift Seals at the Asse II Salt Mine – A Summary of more than a Decade of Experience. WM2021 Conf., March 7–11, Phoenix, USA.

Fischer, H.; Bergmann, U.; Engelhardt, H.-J.; Hund, W. & Köster, R. (2004) Stabilization of the Central Part of the Morsleben Repository – Technical Concept, Requirements, Quality Assurance and Operational Experience. Proc. DisTec 2004, Int. Conf. On Rad. Waste Disp., Section 6 (Backfill and Sealing of Repositories)

Hartwig, G. & Griguhn, H. (2016) Einführung in die Statistische Qualitätskontrolle. 2. Auflage, B. Behr's Verlag GmbH & Co. KG, Hamburg.

Köhler, J.; Teichmann, L.; Heydorn, M. & Wolff, P.E. (2019) Einsatz von Sorelbeton für Verschlussbauwerke und Stabilisierungsmaßnahmen in der Schachanlage Asse II. Mining Report Glückauf, 155 (5): 485-496.

Spörel, F. (2015) Ermittlung charakteristischer Kennwerte für Beton. Bundesanstalt für Wasserbau (BAW), Kolloquium Nachrechnung von (massiven) Wasserbauwerken, 27./28.10.2015, S. 14–20.

Teichmann, L.; Heydorn, M. & Köhler, J. (2017) Einsatz von Sorelbeton für Verschlussbauwerke und Stabilisierungsmaßnahmen in der Schachtanlage Asse II. 3. Internationales Freiburger Fachkolloquium – Versatz und Baustoffe im Bergbau, 05./06.10.2017, TU Freiberg, Freiberg.

Wälder, K. & Wälder, O. (2013) Statistische Methoden der Qualitätssicherung. Carl Hanser Verlag GmbH & Co. KG.

Helm, M. & Zeh, D. (2007) Konformitätskontrolle unter Nutzung des Betonfamilienkonzepts – ein Beispiel für die praktische Umsetzung. Beton. Die Fachzeitschrift für Bau + Technik, 5: 210–219, Verlag Bau+Technik GmbH.

Löslichkeitsverhalten von C-S-H-Phasen in NaCl-gesättigten Lösungen vs. THEREDA (Stand Cemdata18)

TU Bergakademie Freiberg, Institut für Anorganische Chemie, AG Salz- und Mineralchemie

Email: felix.haeusler@chemie.tu-freiberg.de, daniela.freyer@chemie.tu-freiberg.de

Zusammenfassung

Der Kontakt NaCl-gesättigter Lösung mit C-S-H-Phasen führt zur teilweisen Substitution von Ca^{2+} durch Na^+ in der C-S-H-Phase, und zwar um so ausgeprägter je geringer das Ca/Si-Verhältnis in dieser ist. Die so entstehenden C-N-S-H-Phasen erweisen sich über einen untersuchten Zeitraum von 14 Monaten als unveränderlich und zeigen auch keine Neigungen zur Kristallisation. Mit der Bildung der C-N-S-H-Phase verarmt die Kontaktlösung an Na^+ und reichert sich mit Ca^{2+} an.

Die ermittelten Löslichkeitsdaten der C-N-S-H-Phasen stellen eine erste Basis experimenteller Daten zur Bewertung von geochemischen Rechenmodellen, wie THEREDA mit implementierten C-S-H-Mischphasenmodellen aus Cemdata18, für konzentrierte Salzlösungen dar. Von den bisher verfügbaren Modellen kann mit dem CNASH-Modell der Löslichkeitstrend mit bester Näherung beschrieben werden.

Die Ca-Na-Substitution ist auch an Zementprobekörpern in Kontakt mit NaCl-gesättigter Lösung beobachtbar. Sind zusätzlich auch Mg^{2+} -Ionen in der Kontaktlösung enthalten, findet ein quantitativer Austausch mit dem Ca der C-(N)-S-H-Phase unter Bildung von M-S-H-Phasen statt. Die damit einhergehende Veränderung der Lösungszusammensetzung bewirkt eine Untersättigung an NaCl, was sowohl zu Nachlöseprozessen aus dem angrenzenden Wirtsgestein als auch des NaCl-Zuschlags im Salzbeton führt (zu den Randbedingungen der Messungen und Ergebnisse ist anzumerken, dass die Zementprobekörper eine hohe Porosität aufwiesen, um ablaufende Reaktionen im entsprechenden Zeitfenster auch beobachten und messen zu können. Ob diese für reale Zemente und Salzbetonrezepturen, welche nicht nur C-S-H-Phasen, sondern z.B. auch C-A-S-H-Phasen (aluminiumhaltig) aufweisen, ebenso ablaufen, ist weiterhin zu überprüfen).

Einleitung

Die Wechselwirkungen von Portlandzement mit den geologischen Barrieren Steinsalz, Tongestein und Kristallingestein müssen für eine potentielle Anwendung des Baustoffs als Verschluss- oder Verfüllmaterial oder zur Errichtung von Infrastruktur in Endlagern verstanden sein. Für das Wirtsgestein Salz heißt das, die Beständigkeit gegenüber NaCl-gesättigten Lösungen bewerten zu können, um zuverlässig Aussagen zum Langzeitverhalten des Materials treffen zu können.

Bisher gab es zur Wechselwirkung gesättigter NaCl-Lösungen mit C-S-H-Phasen (Bindemittelphasen des Portlandzements) keine Daten in der Literatur (nur für verdünnte Lösungen bis 1.5 M NaCl). Seit März 2023 stehen jedoch erste Daten für 25 °C zur Verfügung. Deren Bestimmung, wie auch im Vergleich mit den bekannten Löslichkeitsdaten in Wasser, wird nachfolgend beschrieben, zusammen mit dem Verhalten von Zementprobekörpern (Modellproben mit hoher Porosität) in entsprechenden Salzlösungen.

Diese ersten experimentellen Daten wurden Modellrechnungen mit den C-S-H-Mischphasenmodellen aus Cemdata18, die in THEREDA für Berechnungen in hochsalinaren Systemen implementiert sind, gegenübergestellt.

Was sind C-S-H-Phasen?

Calciumsilicathydrate (C-S-H) sind Bindemittelphasen in Portlandzement (System $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$). Ihre strukturellen Beschreibungen basieren auf den Schichtsilicaten Tobermorit (siehe Abb. 1) und Jennit. Darin sind Schichten kantenverknüpfter CaO_6 - bzw. CaO_7 -Polyeder von Ketten eckenverknüpfter SiO_4 -Tetraeder umgeben. Zwischen diesen komplexen Schichten können Wassermoleküle sowie weiteres Ca^{2+} eingelagert werden. Anhand dieser Einlagerung sowie Defekten in den SiO_4 -Ketten ergibt sich eine variable Stöchiometrie für die C-S-H-Phasen. Durch variierende Schichtabstände resultieren breite Reflexlagen in Röntgenpulverdiffraktogrammen (XRPD), weshalb sie häufig als amorph beschrieben werden. Für C-S-H-Phasen im Grundsystem $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$ existieren zahlreiche Löslichkeitsdaten bei Raumtemperatur [Walk 2016], welche bei einer großen Streubreite dennoch klare Trends beschreiben: steigende Calciumkonzentrationen und pH-Werte sowie sinkende Siliciumkonzentrationen mit steigendem Ca/Si-Verhältnis des Feststoffs.

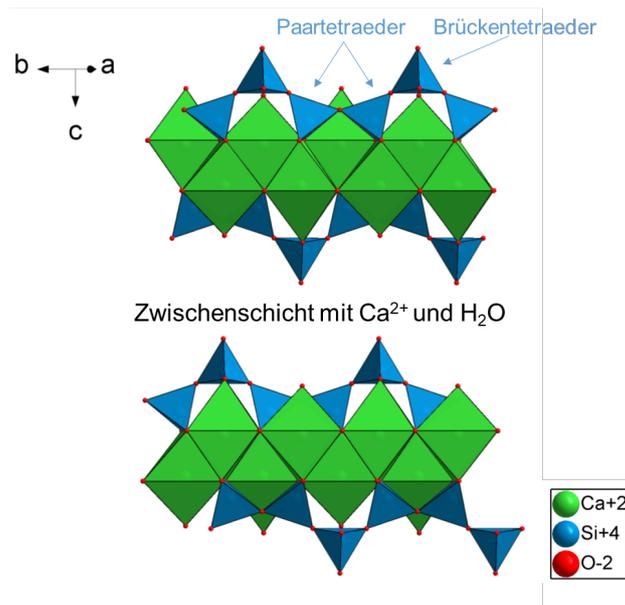


Abb. 1 Ausschnitt aus der Tobermorit-Grundstruktur zur Beschreibung semikristalliner CSH-Phasen, basierend auf der Strukturlösung des 14 Å-Tobermorits [Bona 2005], in 210-Richtung

Löslichkeitsverhalten von C-S-H-Phasen bei 25 °C und NaCl-Sättigung

Bei 25 °C bilden Suspensionen ($w/s = 20$) von $\text{Ca}(\text{OH})_2$ und amorphem SiO_2 mit Wasser bzw. NaCl-gesättigter Lösung bereits in den ersten 24 h semikristalline C-(N)-S-H-Phasen. Festphasenbestand (geprüft mittels XRPD und ^{29}Si -NMR) und Lösungszusammensetzung verbleiben nach 3, 6, und 14 Monaten nahezu unverändert. Die NaCl-freien Proben ordnen sich in den Löslichkeitstrend der Literatur ein, womit auch gleichzeitig die Validierung der im Rahmen dieser Untersuchungen eingesetzten Methoden zur Lösungsanalytik erfolgt ist:

- Calcium: komplexometrische Titrations (EDTA)
- Basizität: potentiometrische Säure-Base-Titrations
- Silicium: UV/Vis-Messungen nach Umsetzung des Siliciums zu gelber Silicomolybdänsäure

NaCl-freie Lösungen wurden zur Ca- und Si-Bestimmung sowohl mittels ICP-OES als auch titrimetrisch und UV/Vis-spektroskopisch analysiert. Der Vergleich der Ergebnisse zeigt gute Übereinstimmung.

Die Zusammensetzung der NaCl-gesättigten (Kontakt-)Lösung weist gegenüber der rein wässrigen Lösung eine bis zu vierfach geringere Si-Konzentration und geringere Basizität in Gegenwart der C-(N-)S-H-Phasen auf (über den gesamten Ca/Si-Bereich ($\text{Ca/Si} = 0.50\text{-}2.00$)). Die Calciumkonzentrationen erhöhen sich in NaCl-gesättigter Lösung hingegen deutlich, besonders bei Kontakt mit C-S-H-Phasen bis $\text{Ca/Si} = 1.00$, wie Abb. 2 zeigt.

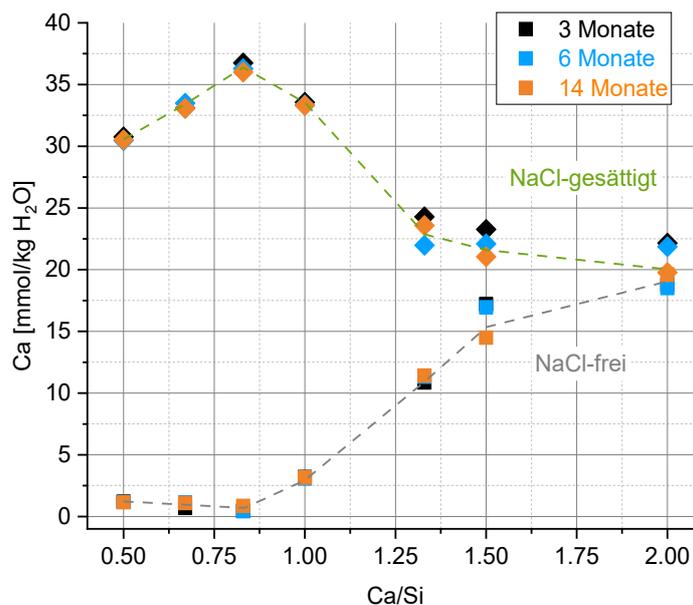


Abb. 2 Experimentell bestimmte Calciumkonzentrationen bei 25 °C in destilliertem Wasser (Quadrate) bzw. gesättigter NaCl-Lösung (Rauten); graue (NaCl-frei) und grüne Linie (NaCl-gesättigt) zur Illustration

In Abhängigkeit des Ca/Si-Verhältnisses in der C-S-H-Phase steigen die Ca-Lösungskonzentrationen bis zu ca. 36.8 mmol Ca/kg H₂O bei $\text{Ca/Si} = 0.83$ und fallen dann auf ca. 20 mmol Ca/kg H₂O bei $\text{Ca/Si} = 2.00$. Dieser Wert liegt noch über der Sättigung von Ca(OH)₂ in konzentrierter NaCl-Lösung (15.7 mmol Ca/kg H₂O [THEREDA]). Daher ist auch bei hohen Ca/Si-Verhältnissen noch von einer Einlagerung von Na⁺ in die C-S-H-Struktur auszugehen.

Die Aufnahme der Na⁺-Ionen in die C-S-H-Phase erfolgt über deren gesamten, möglichen Ca/Si-Bereich ($0.50 < \text{Ca/Si} < 2.00$), was EDX-Untersuchungen belegen. Es lagern sich dabei aber deutlich größere Anteile an Na⁺ in C-S-H-Phasen mit kleineren Ca/Si-Verhältnissen ein, was in Konformität zu den Löslichkeitsdaten steht. Die Substitution der Ca²⁺-Ionen durch Na⁺-Ionen bewirkt die vergleichsweise hohen Ca-Konzentrationen

in Lösung. Deren Maximum bei $\text{Ca/Si} = 0.83$ ist strukturbedingt, da in der Tobermoritstruktur bei diesem Verhältnis Ca^{2+} -Ionen in der Zwischenschicht eingelagert sind, die durch Na^+ ausgetauscht werden können (Tobermoritstrukturösungen mit $\text{Ca/Si} = 0.67$ enthalten hingegen kein Ca^{2+} in den Zwischenschichten). Mit weiter zunehmendem Ca/Si -Verhältnis und damit zunehmendem Ca-Gehalt werden die Schichten über dieses Ca^{2+} zunehmend verbrückt, wodurch sich der Anteil an Zwischenschichtraum verringert. Damit ist der Platzbedarf für zwei Na^+ im Austausch gegen ein Ca^{2+} immer weniger gegeben. Somit ist die Anreicherung der Kontaktlösung an Ca^{2+} wieder rückläufig (sinkende Ca-Lösungskonzentrationen).

Vergleich mit Modellrechnungen (C-S-H-Mischphasenmodelle in THEREDA)

Die Mischphasenmodelle der Cemdata18 [Loth 2019] beschreiben das literaturbekannte Löslichkeitsverhalten von C-S-H-Phasen in Wasser in guter Näherung. Ihre Implementierung in die für hochsalinare Systeme konzipierte Datenbasis THEREDA soll auch die Berechnung des C-S-H-Löslichkeitsverhaltens bei hohen Salzkonzentrationen ermöglichen. Aufgrund der bislang fehlenden experimentellen Daten stand eine Bewertung der Modellergebnisse in salinaren Systemen, wie bei NaCl-Sättigung, aus.

Abb. 3 zeigt vergleichend die nun ersten experimentellen Daten bei NaCl-Sättigung mit den THEREDA-berechneten Ca-Lösungskonzentrationen unter Nutzung der sechs C-S-H-Mischphasenmodelle. Die Modelle berücksichtigen den Einbau von Natriumionen in die C-S-H-Struktur unterschiedlich stark, was in Folge zu deutlicher Varianz in den berechneten Calciumkonzentrationen führt. Dabei ist die Abweichung bei kleineren Ca/Si -Verhältnissen infolge der gemessenen stärkeren Na^+ -Aufnahme größer. Die größten Abweichungen ergeben die Modelle CSH3T und CSH-II (blau), welche den Einbau von Na^+ in die C-S-H-Struktur nicht berücksichtigen. Der experimentell festgestellte Verlauf mit Maximum bei $\text{Ca/Si} = 0.83$ wird qualitativ vom CNASH-Modell (rot) wiedergegeben, welches damit derzeit am besten für Trendrechnungen in NaCl-gesättigten Lösungen geeignet ist.

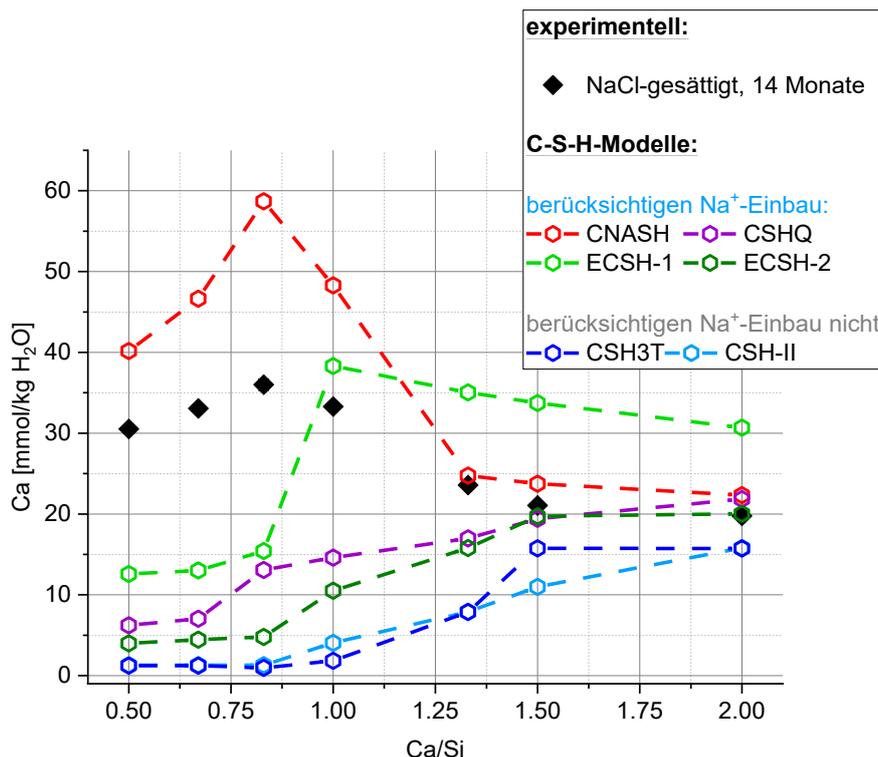


Abb. 3 Vergleich von Ca-Lösungskonzentrationen bei NaCl-gesättigter Lösung in Kontakt mit C-S-H bei 25 °C; exp. Daten (schwarz) und Berechnungen mit Cemdata18-Mischphasenmodellen (farbig)

Wechselwirkungen von Zementprobekörpern mit Salzlösungen

In weiteren experimentellen Untersuchungen wurden über drei Monate abgebundene C-S-H-Zement- sowie Salzbeton-Proben ($Ca/Si = 0.50, 1.00$ und 2.00) für zwei Jahre in NaCl-gesättigter sowie NaCl-gesättigter, 4 molaler $MgCl_2$ -Lösung gelagert, um den Einfluss auf die kompakten Probekörper sowie die Lösungszusammensetzung zu überprüfen. Im Untersuchungszeitraum drangen die Salzlösungen vollständig in alle Probekörper ein, was mittels RFA-Messungen an den Bruchflächen intakter Proben belegt werden konnte.

Zementprobekörper in Kontakt mit NaCl-gesättigter Lösung weisen keine optischen Veränderungen auf. Die Porenlösungen haben sich aufgrund der hohen Porosität der Probekörper vollständig mit der Kontaktlösung vermischt. Im Fall des NaCl-freien C-S-H-Zements führt dies zur Untersättigung an NaCl in der Kontaktlösung. Im Realfall hätte das Anlöseprozesse des umgebenden Wirtsgesteins zur Folge. Für Salzbeton-Proben ist dies aufgrund der NaCl-Sättigung der Porenlösung nicht der Fall. In der Kontaktlösung stellen sich in Abhängigkeit des Ca/Si -Verhältnisses des C-S-H-Zements und

Salzbetons Calciumkonzentrationen ein, die dem Trend der in Kapitel „Löslichkeitsverhalten von CSH-Phasen“ gezeigten Löslichkeitsbestimmungen entsprechen. Die teilweise Substitution von Ca^{2+} durch Na^+ und somit die Bildung von C-N-S-H-Phasen mit deutlich anderem Löseverhalten als für C-S-H in Wasser wird hiermit auch an abgebundenen C-S-H-Probekörpern bestätigt.

Sobald die Kontaktlösung Mg^{2+} enthält, findet die quantitative Umwandlung von C-S-H zu M-S-H-Phasen statt, solange die Lösung Mg^{2+} enthält. Im Gegenzug gehen Ca^{2+} -Ionen äquimolar in die Kontaktlösung über. Ein schneller Zerfall von Probekörpern wird immer dann beobachtet, wenn neben C-(N-)S-H noch $\text{Ca}(\text{OH})_2$ und/oder NaCl im Festphasenbestand vorliegen. $\text{Ca}(\text{OH})_2$ löst sich in Kontakt mit Mg^{2+} -haltiger Lösung unter $\text{Mg}(\text{OH})_2$ -Fällung auf. Durch die veränderte Lösungszusammensetzung (Austausch von Mg^{2+} durch Ca^{2+}) erhöht sich die Wasseraktivität, was eine NaCl-Untersättigung der Lösung zufolge hat. Der NaCl-Zuschlag in den Salzbeton-Proben wird folglich angelöst, was zum Zerfall der Probekörper geführt hat (alle beschriebenen Reaktionen wurden mittels XRPD und RFA verfolgt).

Literatur

- [Bona 2005] E. Bonaccorsi, S. Merlino, J. Am. Ceram. Soc., 88,
505-512, 2005.
- [Loth 2019] B. Lothenbach et al., Cem. Con. Res., 115, 472-506, 2019.
- [THEREDA] Thermodynamische Referenzdatenbasis, Release 2021.
<https://www.thereda.de/de/>
- [Walk 2016] C. S. Walker et al., Cem. Con. Res., 79, 1-30, 2016.

1.5

G.D. Miron¹, B. Lothenbach², and D.A. Kulik¹:

**Thermodynamic Modeling of cementitious systems: Cemdata18,
CemGEMS, ongoing C-(A)-S-H model development, and
integration with THEREDA**

¹ *Paul Scherrer Institute, Villigen PSI, Switzerland*

² *EMPA, Dübendorf, Switzerland*

Email: dan.miron@psi.ch

Introduction

Thermodynamic modeling of cementitious materials is used to predict the hydrated phase assemblages, pore solution composition and pH of mixtures with different chemical compositions and water/binder (w/b) ratios. Thermodynamic modeling helps to understand the effect of factors such as cement mix composition, hydration, external solutions, leaching, or temperature on the phase assemblage and properties of a hydrated cementitious system. Complex modeling frameworks can be constructed by coupling reactive transport models with the feedback from changing mechanical properties. By providing insight into the chemical processes and interactions within cementitious materials, thermodynamic modeling enables researchers and engineers to optimize the performance of cementitious materials in terms of strength, durability, and environmental impact. The approach allows for the exploration of a wide range of conditions and material compositions, as well as time scales that cannot be achieved under laboratory conditions. Thermodynamic modeling allows to estimate the evolution of cementitious materials in different environments (e.g. seawater, brine, wetting and temperature cycles), their interaction with different materials (metals, clay, organics) and the durability evolution for very long time scales, such as those of interest in safety studies of radioactive waste disposal.

In chemical thermodynamic modeling, all chemical interactions between phases such as solids, solid solutions, gas phase, and aqueous electrolytes are considered simultaneously. Therefore, it requires knowledge of the thermodynamic properties of all substances that can form in the system. These data consist of reliable formation properties or equilibrium constants for dissolving and precipitating solid phases of interest and for forming dissolved species in aqueous solution. The quality of the results of

thermodynamic modeling is directly related to the range of applicability, the accuracy, and the completeness of the thermodynamic properties at the temperature, pressure, and composition of interest.

There are challenges in achieving good thermodynamic modeling results, such as the availability of accurate and complete thermodynamic data for cement hydrate phases, the formation of complex solid solutions and the models available to describe them, the consideration of highly concentrated pore solutions, and the incorporation of metastability and kinetics into the models. The application of thermodynamic modeling to cementitious materials has become significantly more appropriate, realistic, and predictive as more high-quality thermodynamic data for cement hydrate phases have been determined experimentally. Obtaining accurate and consistent thermodynamic data for cement phases is challenging as it requires extensive experimental work and data synthesis. Using specific guidelines and methods for data evaluation and selection, experts compile thermodynamic properties of substances and reactions into ready-to-use, consistent thermodynamic datasets/databases, usually for specific fields of application (e.g., cemdata for cement hydrates). Within such a field, these datasets are generally comparable but may not be directly compatible and may still differ based on the experiments selected, the methods used to model the experimental data, such as chemical system definition, aqueous species properties, aqueous activity model, temperature extrapolation methods, and description of solid solution models. Therefore, combining data from different data sets and models can lead to inconsistencies in the thermodynamic data. Thermodynamic modeling is also used in conjunction with experimental methods to validate and refine thermodynamic data and model parameters, but also as a method for more complete interpretation of limited experimental data sets and can help identify key experiments to be performed.

Major cement hydrate phases such as C-S-H (calcium-silicate-hydrate), M-S-H (magnesium-silicate-hydrate), AFm, AFt, hydrogarnets and hydrotalcite are challenging to model because in real systems they form solid solutions that exhibit complex changes in composition as a function of changing conditions. Solid solutions add complexity to the modeling and simulation of cementitious systems, but are necessary for a correct description. Therefore, the development and use of solid solution models of varying complexity are necessary to support accurate modeling of the equilibrium solid and pore water composition in hydrated (mixed) cementitious materials. They are necessary for improved

prediction of pore solution properties, retention of various cations and anions, which are related to the correct prediction of stable phase assembly and evolution of the system.

An aqueous activity model is required to account for the interactions between dissolved solutes in the aqueous solution. It is used to calculate the activity coefficients of ions and complexes. In dilute to moderately concentrated solutions, activity models such as extended Debye-Hückel or SIT can be used. The Pitzer model has been successful in accurately modeling highly concentrated multicomponent solution systems containing several highly soluble salts. This model can be advantageous when modeling cementitious systems with highly concentrated pore solutions such as in the case of: alkali activated systems, salt solution ingress, evaporation, etc.

The main prerequisites for the modeling of cementitious materials in different environments and over wide ranges and compositions are: an accurate and complete thermodynamic data set for the cement hydrate phases, including the models and parameters for solid solution models (e.g. C-S-H, M-S-H, etc.), thermodynamic data for the aqueous species, an activity model that allows an accurate description of their properties over wide ranges of concentrations, and the modeling tools that combine the models and data, for defining the conceptual model, setting up the chemical system, and performing the calculations.

The following sections provide an overview of the Cemdata18 database, which contains thermodynamic data for common cement hydrates. The GEMS geochemical modeling program, a tool that can use Cemdata18 for modeling cementitious systems, is introduced. The CemGEMS web application, designed for cement chemists and engineers, allows users to run customized processes for cement hydration, blending, carbonation, leaching, salt ingress, and more. The development of the extendable solid solution model CASH+ for C-S-H is presented. Its role in modeling the retention of cations such as alkali and alkaline earth metals is shown. Finally, the extension of the THEREDA database with cement data from Cemdata18 is outlined, along with ongoing efforts to update the Pitzer interaction parameters for aqueous Si and Al species, allowing for improved modeling of cementitious materials in the presence of high salt concentrations.

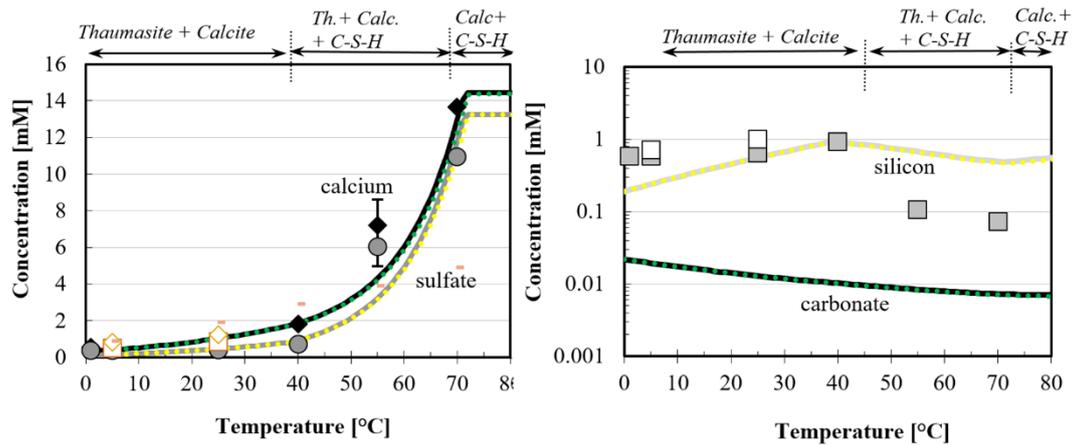


Fig. 1 Calculated (curves) thaumasite solubility, using data in GEM format; Calculated thaumasite solubility (dotted lines), based on data in PHREEQC format. Reproduced from (Lothenbach et al., 2019)

Thermodynamic databases (cemdata)

Cemdata18 (Lothenbach et al., 2019), is an extensive database for cementitious systems that includes thermodynamic data for a wide range of cement hydrates, such as C-S-H, AFm, AFt phases, hydrogarnet, hydrotalcite, zeolites, and M-S-H. The data is applicable for temperatures between 0 and at least 100°C and is compatible with GEMS (Kulik et al., 2013) and PHREEQC (Parkhurst and Appelo, 2013) modeling tools (Fig. 1). It is also available for Geochemist Workbench code (Bethke et al., 2017). The thermodynamic data was derived from critically selected experimental data on the solubility of relevant phases combined with additional experiments for retrieving data on critical phases, solid solutions and the verify existing data (Lothenbach et al., 2019).

Compared to its predecessor, Cemdata07 (published between 2006-2008), Cemdata18 has undergone significant improvements, particularly in aluminum and iron-containing phases and changes in C-S-H models related to volume and alkali uptake. This update is especially useful for modelling hydrated Portland-, Ca-aluminate-, Ca-sulfoaluminate- and blended cements, as well as alkali-activated materials. When comparing between the two database versions, modeling leads to considerably different results on the predicted phase assemblage (Fig. 2).

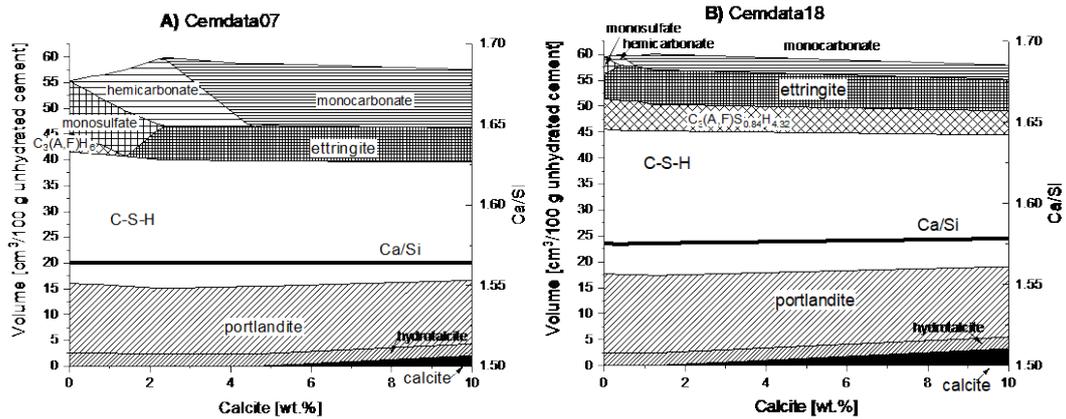


Fig. 2 Comparison of calculated solid phase assemblage using A) Cemdata07 and B) Cemdata18 assuming complete hydration of Portland Cement. Reproduced from (Lothenbach et al., 2019)

Cemdata18's stability constants for cement phases were obtained by recalculating experimental data using PSI/Nagra 12/07 (Hummel et al., 2002; Thoenen et al., 2014) as a source for aqueous species, gas, and other solid components participating in the reactions. This makes Cemdata18 fully compatible with the PSI/Nagra 12/07 chemical thermodynamic database. For the GEM-Selektor geochemical modeling software, the Gibbs energy of formation for all Cemdata18 components was calculated based on their reported log K's (Lothenbach et al., 2019) and reactants from the PSI/Nagra 12/07. Additional data for solid phases relevant to cementitious systems are included in Cemdata18, sourced from PSI/Nagra 12/07. Solid solution models for AFm, AFt, C-S-H, and M-S-H are also incorporated in the Cemdata18 database GEM-Selektor version. In the PHREEQC version the user needs to provide the solid solutions in the calculation script.

The experimental data used to derive thermodynamic data in Cemdata18 was modeled using the background electrolyte extended Debye-Hückel activity model. This model is known to be valid up to 1 molal ionic strength and systems dominated by one major background electrolyte (e.g. KOH, NaCl). The derived solubility constants depend to a certain degree on the activity model, but because most of the experimental data was done using simple background electrolyte solutions it is expected that the standard solubility constants at reference infinite dilution can be used with other activity models (e.g. SIT, Pitzer). The Pitzer model is more suitable for modeling systems with highly concentrated multicomponent solutions (up to saturation of soluble salts), that requires specific interactions for Al-Si, Ca-Si and Al-K aqueous species.

When modeling different processes related to cement materials there is a large degree of kinetics and metastability that needs to be considered. Therefore when generically using the Cemdata18 database for equilibrium calculations, based on their thermodynamic data alone, some phases are more stable than others, but they might not form during the timescale of the observations. For example, the Fe-containing AFm and AFt hydrates have a limited stability field due to the high stability of goethite (FeOOH) and hematite (Fe_2O_3). The latter should be suppressed when doing calculations at ambient conditions in favor of microcrystalline FeOOH (or microcrystalline or amorphous $\text{Fe}(\text{OH})_3$), but should be allowed to form at elevated temperatures ($> 50\text{ }^\circ\text{C}$) or when considering very long time scales. Similarly, the formation of gibbsite ($\text{Al}(\text{OH})_3$) and quartz (SiO_2) should be suppressed in favor of microcrystalline or amorphous $\text{Al}(\text{OH})_3$, and amorphous SiO_2 . This shows that for modeling cementitious systems additional expert knowledge is needed backed up by experimental data and observations that validate different assumptions.

While in GEMS codes the calculations consider all possible phases that might form for a given composition, in other codes the user needs to provide the list of possible phases that might be expected to form and if not provided they will appear as supersaturated in the results and can be then added in the calculation script.

There are always new experimental data related to cementitious systems, which leads to the need of updating the thermodynamic database. Additional updates to the Cemdata18 were released with data for phosphate containing solids and aqueous complexes for modeling hydrated magnesium and calcium phosphate cements (Xu et al., 2022). And thermodynamic data for Ca-, K-, and Na-zeolites (Ma and Lothenbach, 2021, 2020a, 2020b) commonly encountered in cement, useful for modeling alkali activate cement, late stages of cement degradation and cement clay interaction. Several alternative C-S-H models are available in Cemdata18, e.g., CSHQ (Kulik, 2011) that may be used for Portland Cement systems, and CNASH (Myers et al., 2014) useful when modeling alkali activated systems. An extendable CASH+ C-S-H model that can account for the uptake of various cations (Na, K, Al, Fe, etc.) is being developed and will be part of next releases of Cemdata. Updates to Cemdata consistent with the OECD Nuclear Energy Agency (NEA) and recent release of the PSI/Nagra database TDB 2020 (Hummel and Thoenen, 2021) are planned.

Solid solution models (CASH+)

The properties and long-term durability of hydrated cement pastes and concretes are largely determined by the varying compositions of calcium silicate hydrate (C-S-H) phases. These phases play a crucial role in incorporating different cations such as Na, K, Al, Fe cations, base metal cations, actinides, lanthanides, fission products, and, which are important to the management of radioactive waste. The behavior of the C-S-H phase significantly impacts the properties of the pore solution, the pH level, and the retention/mobility of relevant ions within cementitious materials used as waste storage matrices or engineered barriers. Therefore, accurate chemical thermodynamic models are necessary for predicting to the stability, density, solubility, and composition of the C-S-H phase. These calculations must account for various factors such as changes in the cement mixture, water-to-binder ratio, temperature fluctuations, carbonation effects, leaching, and other influential variables. Earlier endeavors aimed at expanding solid solution models for C-S-H involving these cations met with partial success. This was mainly due to insufficient consideration of cations binding to specific structural sites. Consequently, the resulting models lacked an incremental nature and failed to accurately describe the uptake isotherms observed at different ratios of calcium to silicon (Ca/Si).

The CASH+ sublattice solid solution model (Kulik et al., 2022; Miron et al., 2022b) represents a significant advancement over previous models in terms of accuracy and structural consistency. This model is based on the defect-tobermorite structure, where simultaneous substitutions of ionic components or vacancies occurring within two distinct sublattices are considered. These sublattices consist of interlayer cationic (IC) sites and bridging tetrahedral (BT) sites (Fig. 3). In the current formulation, interlayer water (IW) sites are regarded as electrically neutral and solely occupied by H₂O molecules. In future extensions for modeling different degrees of hydration, these can be also considered as vacant.

The solid solution endmembers are determined by all possible permutations of chemical moieties (species) within the IC and BT sublattice sites. For example, for the base C-S-H model (system Ca-Si-O-H) we allow Ca, Si and vacancy to be exchanged in the BT site and Ca and vacancy to be exchanged in the IC site. To account for the non-ideal mixing within each sublattice, an interaction parameter for each pair of substituting components is introduced.

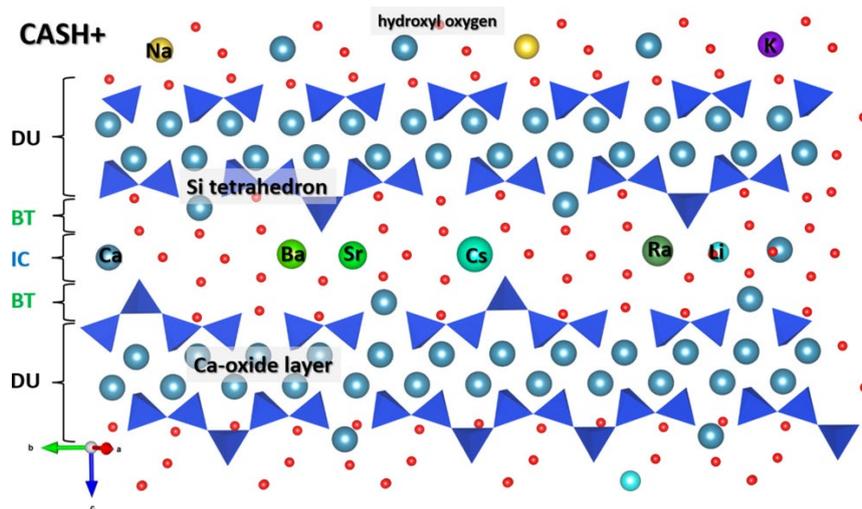


Fig. 3 Schematic diagram for the CASH+ model representing the C-S-H (defect tobermorite) structure. The dimeric unit (DU), bridging tetrahedral (BT), and the interlayer cation (IC) are sites in the C-S-H model structure that can be occupied by different elements (Miron et al., 2022b)

Given the intricate nature of multi-site solid solution models, which involve numerous parameters to be fine-tuned simultaneously, we employed GEM-Selektor and GEMS3K codes (Kulik et al., 2013), along with the TSolMod library of solution models (Wagner et al., 2012), to calculate equilibria within complex aqueous-solid solution systems. Additionally, the GEMSFITS code (Miron et al., 2015) facilitated the optimization of multiple parameters. The stabilities of endmembers and site interaction parameters are incrementally fitted against the measured aqueous and solid phase compositions and NMR-derived mean silicate chain length (MCL) for a wide range of experimental variables, including cases when other hydrated solid phases are present in the system.

The initial parameterization of the CASH+ model focused on the Ca-Si-H₂O sub-system (Kulik et al., 2022), allowing for substitutions of Ca in both IC and BT sites. Subsequently, the model was extended to incorporate the uptake of alkali and alkaline earth metals (Miron et al., 2022b), restricting their substitutions exclusively to IC sites. This modification led to accurate predictions aligning well with experimental data but necessitated re-adjustment of endmember stabilities relevant for high Ca/Si in the Portland cement systems (Miron et al., 2022a). When addressing the incorporation of Al, reproducing the experimental data necessitated allowing substitutions within the BT and IC sites and preliminary results show that the model can be extended for the uptake of Fe(II, III) but without being able to discriminate between uptake into an IC site, a BT site or both sites. Additional structural data for the uptake of iron are needed for better constraining the CASH+ model. At present the model includes Ca, Si, H₂O, Al, Na, K, Li, Cs, Mg, Ba, Ra, Sr; and work is on-going to add iron, actinides U, Np; as well as Zn and other hazardous metals. The advantage of the model is that it can be incrementally extended without the need for refitting the previous systems.

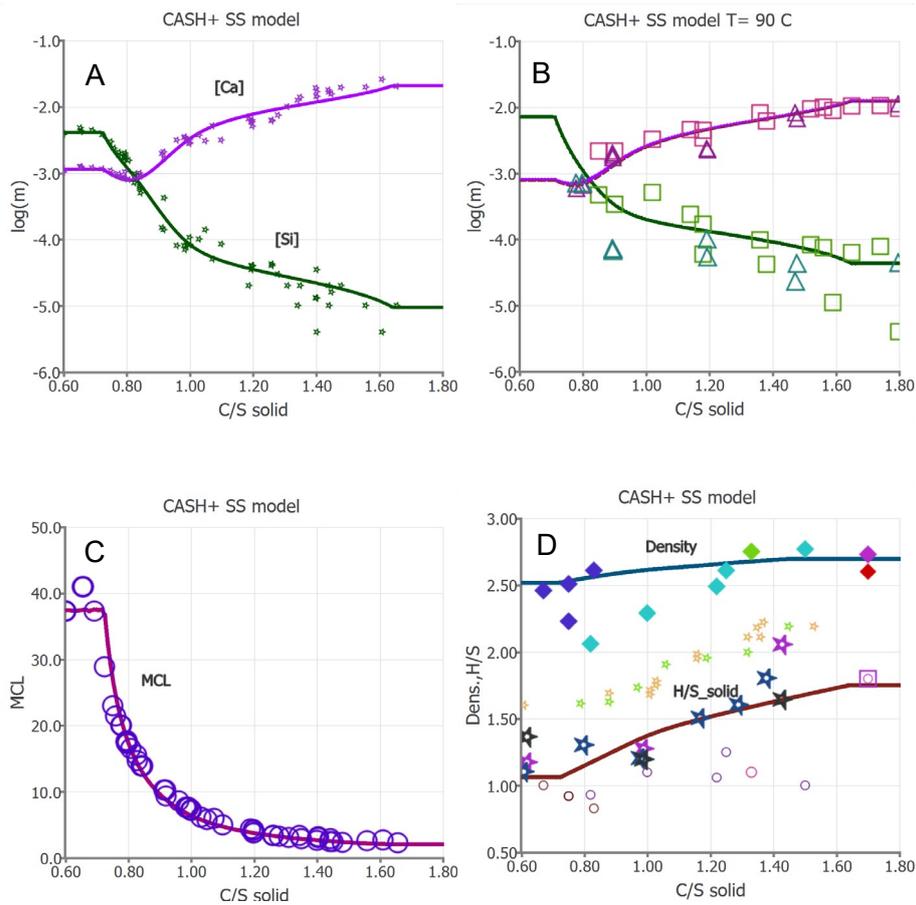


Fig. 4 Model predictions (curves) compared with measured data (symbols) on C-S-H: (A) solubility at 25 °C; (B) solubility at 90 °C; (C) MCL; (D) density and non-gel water content

The CASH+ model is structurally consistent: it reproduces the impact of Ca/Si and alkali uptake on MCL, describes the solubility, interlayer water content, density and MCL of variable-composition C-S-H (Fig. 4). Application of CASH+ model to moderately elevated temperatures is possible using volume-based-thermodynamic approximations. The CASH+ model with extensions can be directly used together with the Cemdata18 database (Lothenbach et al., 2019) in GEMS codes for simulating equilibrium solid- and pore-water compositions in blended hydrated cement materials (Fig. 5), cementitious waste forms, or waste-clay-cement interfaces. To be used in other codes that do not have an implementation of multi-site non ideal solid solution models CASH+ can be discretized into many pseudo-compounds and exported for PHREEQC and other mass law action codes. Future updates are considered to be able to account for the sorption of anions (e.g. Cl^- , SO_4^{2-} , NO_3^- , etc.) onto CSH using a surface complexation model. This is of importance as it will have a large impact on the phase assemblage, pore solution composition and retention of different elements in anionic complexation.

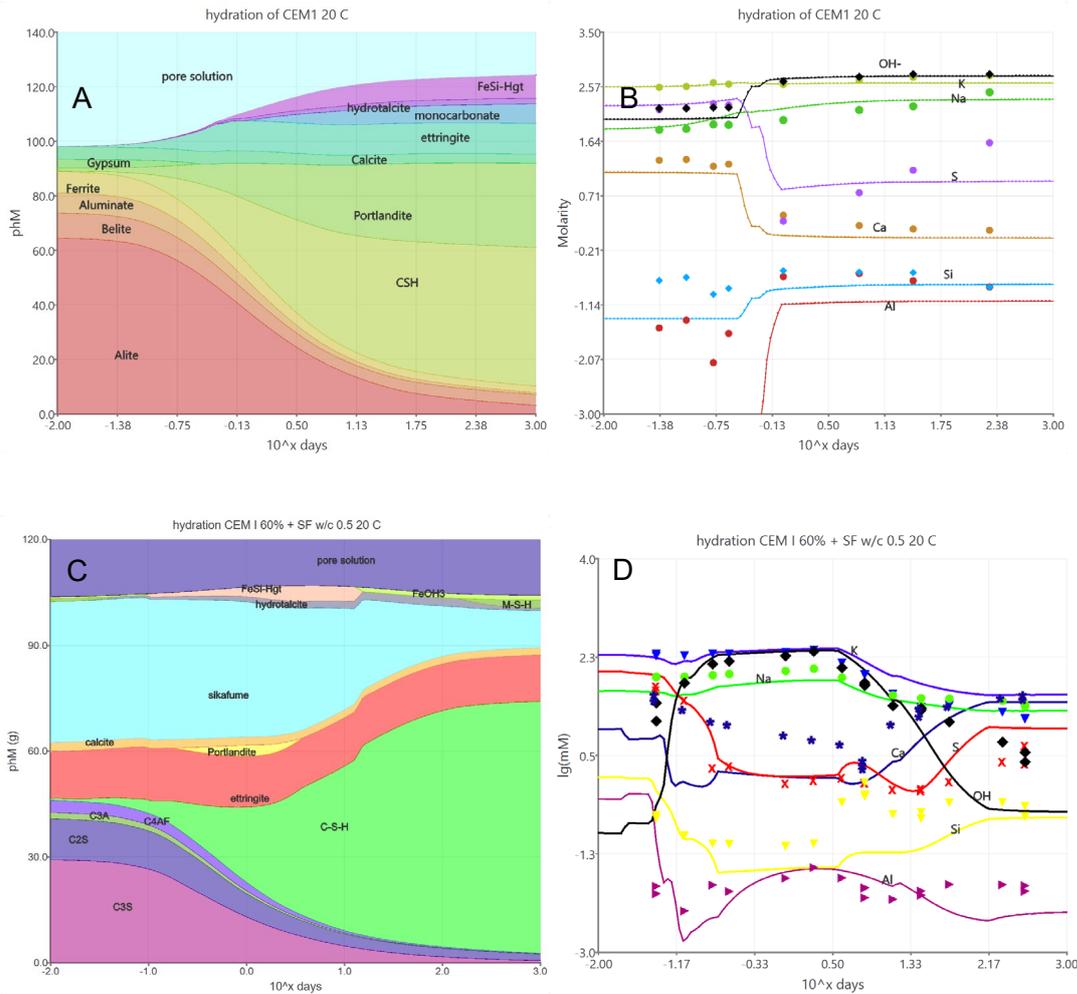


Fig. 5 (A, B) Modeled hydration of Portland cement (PC) and (C, D) PC blended with silica fume (SF) at 20 °C using cemdata and CASH+ solid solution model (Miron et al., 2022a)

(A, C) Evolution of clinker dissolution and cement hydrates; (B, D) calculated (lines) vs measured (symbols) (Lothenbach et al., 2014, 2008) pore solution composition. Differences in measured and calculated OH⁻ could be due to the presence of other organic anions, from the used set accelerator and superplasticizer, which were not considered in the modelling. Modified from (Miron et al., 2022a).

Tools and methods for thermodynamic modeling of cementitious materials

Chemical thermodynamic calculations using Gibbs Energy Minimization (GEM) method implemented in GEMS software (Kulik et al., 2013; <https://gems.web.psi.ch>) has been over 20 years used extensively in geochemistry and (radioactive) waste repository assessment (Kulik et al., 2004), supported by several available thermodynamic databases. After successful introduction of a dedicated thermodynamic database for cements – Cemdata (Lothenbach et al., 2008; Lothenbach and Winnefeld, 2006), the GEM-Selektor code from GEMS became a *de facto* standard modelling tool in cement chemistry. Currently, it is widely used with Cemdata18.01 (Lothenbach et al., 2019) and Zeolite21 (Ma and Lothenbach, 2021, 2020a, 2020b) thermodynamic databases. Overall, at present (mid-2023), there are more than 1000 active users of GEMS, which was directly cited in ca. 1500 publications.

The utility of GEMS in cement research is partially due to the GEM method, especially useful for solving equilibria in complex systems containing aqueous electrolyte (Debye-Hueckel, SIT,) and many (non-ideal) phases-solutions, even so complex as the CASH+ model (Kulik et al., 2022; Miron et al., 2022b) or Pitzer aqueous activity model (see below).

Thermodynamic equilibrium calculations for cementitious materials enable predictions of stable phases and solution composition. In turn, this helps to understand the impact of cement composition, hydration, leaching, or temperature on the phases and properties of a hydrated cementitious system. Some solid phases may be inert or react slow and thus remain metastable, in a partial equilibrium state. This is a working concept for modeling cement hydration, where the clinkers do not react completely even for several months or years. The GEM-Selektor code package is best suited for simulating such cases by means of the additional metastability restrictions on the amounts of chemical species (Kulik et al., 2013). The main uncertainties of thermodynamic modeling trace back to a correct account of metastability of phases or chemical species, to the presence or absence of relevant equilibrating phases, to errors in the input compositions and standard thermodynamic data, and to assessing realistic ranges of temperature and pressure. The impact of all these uncertainties can be evaluated in sensitivity analysis calculations.

Using GEMS codes implies a considerable learning curve, experience and effort: the user should be educated enough and has to spend time on putting together realistic cement recipes based on the clinker content, amount and composition of supplementary cementitious materials (SCMs), water/binder mass ratio, and known reaction extent/degree of the initial mass of clinkers and/or SCMs. The actual calculation of equilibrium state is then a matter of seconds. Moreover, setting up a simulation of cement hydration, even if assisted by a “process wizard” in GEM-Selektor, requires an expert knowledge to write a rather complex process script and to arrange its controls, and to prepare another script for collecting and plotting the results.

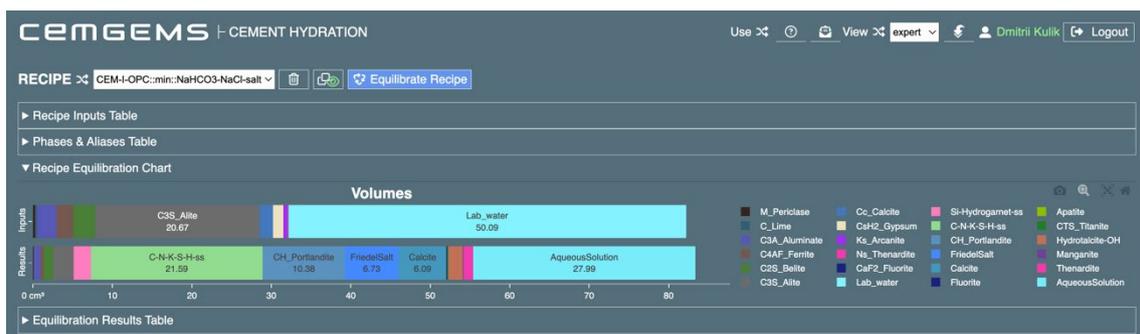
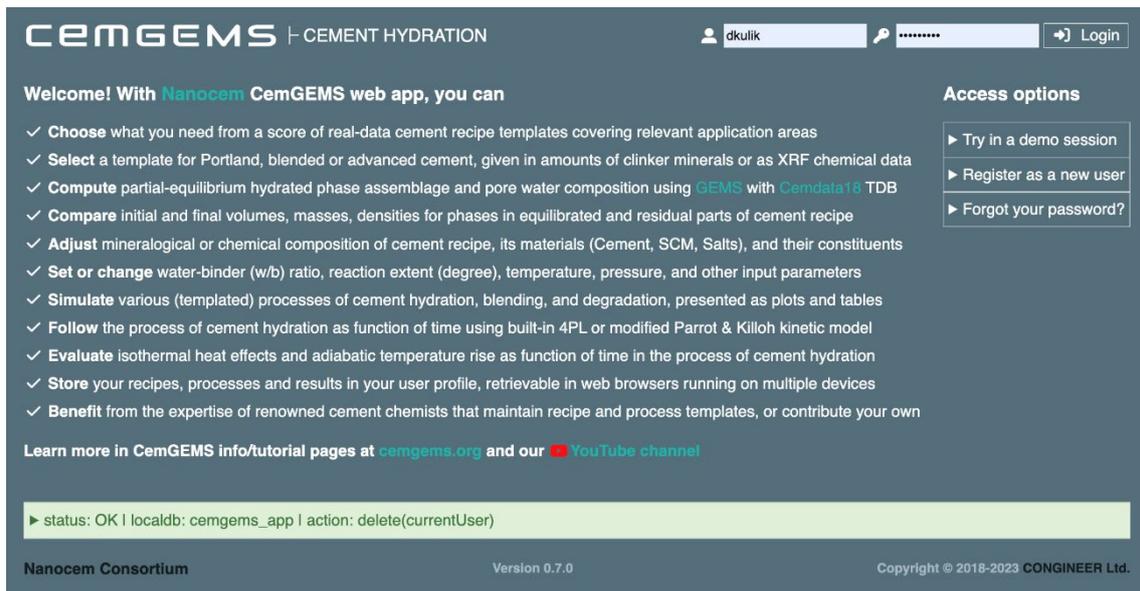


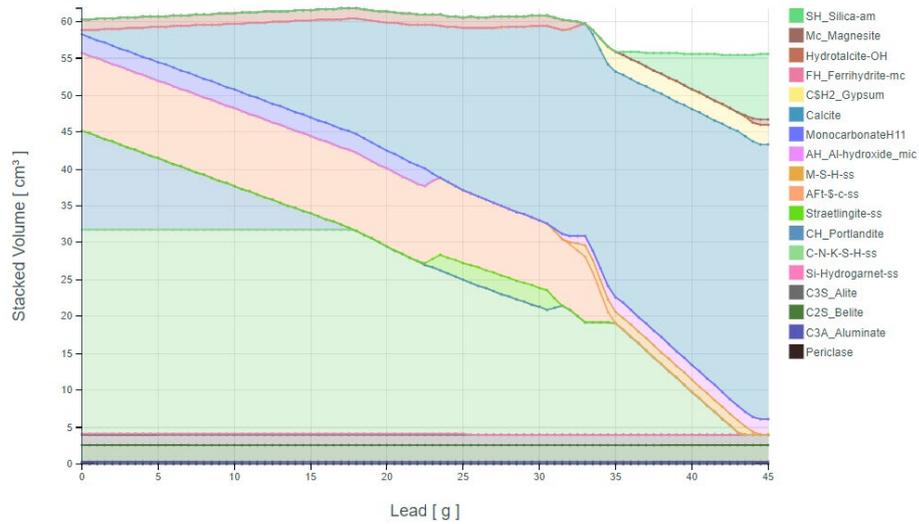
Fig. 6. Screen images of the CemGEMS landing page and of an equilibrated recipe diagram for Portland cement with added NaCl+NaHCO₃ salt, showing the initial and the equilibrated (at 20 °C) volumes of phases

The actual process simulation and plotting is then a matter of minutes. The recognition of these difficulties was our main motivation for developing CemGEMS (<https://gemgems.app>; (Kulik et al., 2021)), Fig. 6.

CemGEMS is a web application for assisting cement chemists and engineers with easy-to-use thermodynamic models of hydration, blending and degradation of cementitious materials in research and practice. After only a minimal training, the user can work efficiently (only in web browser) with tree-like tables on the provided detailed templates for over ten main types of cement recipes and six different types of processes, thus saving many hours (if not days) of diligent work. CemGEMS back-end (server) includes GEMS3K – part of GEMS software collection, the same numerical code as used in GEM-Selektor for calculating complex chemical equilibria. Furthermore, backend GEMS3K calculations use (exported) PSI-Nagra and Cemdata18 thermodynamic datasets covering temperature range from 0 to 100 °C and pressures up to 100 bar. Because of that, GEMS3K produces the same results as the GEM-Selektor code for the same setup of cement chemical system (Fig. 7).

Since 2018, CemGEMS web app is developed and maintained in Switzerland at CONGINEER LLC in collaboration with leading scientists from Empa, PSI, EPFL, ETHZ and industry. From 2018 until 2022, the project was funded by the international Nanocem consortium. CemGEMS has a tutorial site (<https://cemgems.org>) and a YouTube channel (<https://www.youtube.com/@cemgems>) for posting training screencasts, adding a value for education in cement chemistry. To date (mid-2023), there are more than 700 registered users of CemGEMS web app, already cited in ca. 20 publications.

A) Salt Ingress process: Interaction with CO₂ (CemGEMS)



B) Salt Ingress process: Interaction with CO₂ (GEM-Selektor)

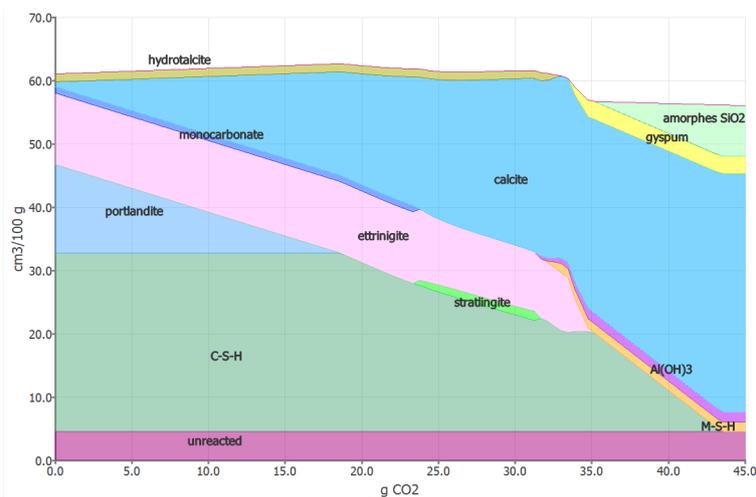


Fig. 7 Screen images (A) from CemGEMS and (B) from GEM-Selektor showing equilibrium phase assemblages during carbonation of a white Portland Cement at W/B = 0.5, 20°C and degree of hydration 90%: The undegraded cement paste is on the left-hand side; while moving to the right, more added CO₂ (in grams) reacts with the hydrates. Reproduced from (Kulik et al., 2021)

The carbonation process shown in Fig. 7 is hypothetical, designed for demonstration of qualitative sequence of phase changes. Experimentally, the different steps might occur simultaneously in cements exposed to carbonation, and/or the carbonation may stop due to kinetic reasons or due to the absence of sufficient water for the reaction to occur. Formally, such simulations belong to the group of *salt ingress* processes, where CO₂ is

treated as one of many constituents of the “Salt” material added to “Cement”, “SCMs” and “Water” materials. By simply changing the composition of “Salt” material to e.g. SeaSalt, or NaCl, or NaCl and NaHCO₃, or Na₂SO₄, and so on, various types of “salt attack” can be qualitatively simulated at a desired W/B ratio. In such processes, a simultaneous removal of CaO, KOH, H₂O etc. is also possible. In the present implementation of thermodynamic dataset used in CemGEMS backend, only extended Debye-Hueckel aqueous activity model is used, which limits the ionic strength of porewater in cement to maximum 2.0 molal or ca. 3-5 g NaCl per 100 g cement at W/B = 0.5. In the near future, alternative thermodynamic datasets can be implemented in CemGEMS, for instance THEREDA + Pitzer + Cemdata18, (optionally with CASH+ model of C-S-H), which will make it possible to model a full range of cement-brine interaction in processes such as salt attack (+- carbonation), leaching and other types of cement degradation.

Also the interaction with alkali activated slag cements, calcium sulfoaluminate cements or any other cement, as well as the combined interaction with chloride, sulfate, seawater or any other salt can be simulated either with GEM-Selektor or with CemGEMS.

Pitzer model for saline solutions (THEREDA)

The THEREDA database project (Moog et al., 2015) is developed for modelling systems related to the radioactive waste disposal. The database is especially concerned with high-salinity aqueous solutions (brines) based on the Pitzer activity model approach. The Pitzer model (Pitzer, 1991) provides a more accurate representation of the non-ideal behavior of electrolytes, especially at high concentrations and allows calculations of multicomponent salt solubilities up to high concentrations. The main disadvantage of the model is the large number of parameters and parameter coefficients that are needed for a complete polythermal dataset (Voigt, 2015).

The THEREDA database has been extended with thermodynamic data for cement hydrate phases from cemdata database. The solubility constants of cement phases were recast and their values calculated based on the THEREDA aqueous speciation data (Wilhelm, 2013). These are consistent with the data present in the PSI/Nagra database (Thoenen et al., 2014) used in developing of cemdata (Wilhelm, 2013).

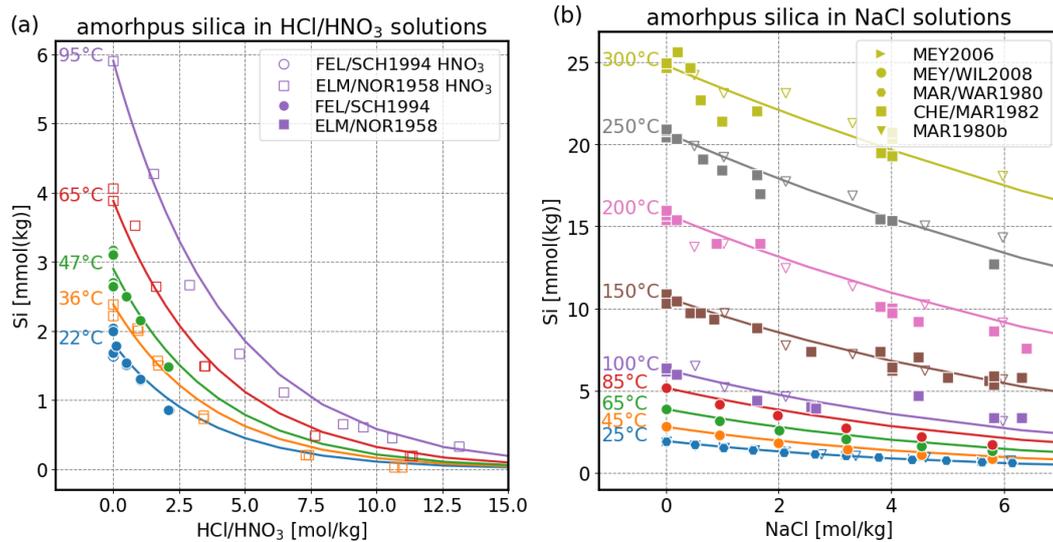


Fig. 8 Comparison between measured (symbols) (Chen and Marshall, 1982; Elmer and Nordberg, 1958; Felmy et al., 1994; Marshall, 1980; Marshall and Warakowski, 1980; Meyer, 2006; Meyer and Willms, 2008) and calculated (lines) amorphous silica solubility in different binary electrolyte solutions at different temperatures using the optimized interaction parameters.

To be able to model interaction of cement with brines up to salt saturation a polythermal set of parameters for possible interaction of aluminum and silica species in the system Na-K-Ca-Mg-S-C-Cl is necessary. Work is under way to derive a polythermal Pitzer parameter dataset consistent with THEREDA and Cemdata18 databases where possible by fitting against experimental data or using estimation methods based on analogies or correlations when no measurements are available. Meyer and Willms (Meyer, 2006; Meyer and Willms, 2008) provide an extensive experimental dataset on the solubility of amorphous silica in binary and ternary salt systems at 25°C (Meyer, 2006) and at 45, 65 and 85°C (Meyer and Willms, 2008), as well as isopiestic investigations of Al-containing salt solutions at the same temperatures. These experiments are used as a basis for evaluating the necessary Pitzer interaction parameters and, are complemented by the additional data from a literature review. Calculations are done using the GEM-Selektor modeling program, and GEMSFITS (Miron et al., 2015) code is used to fit the parameters against measured data (Fig. 9).

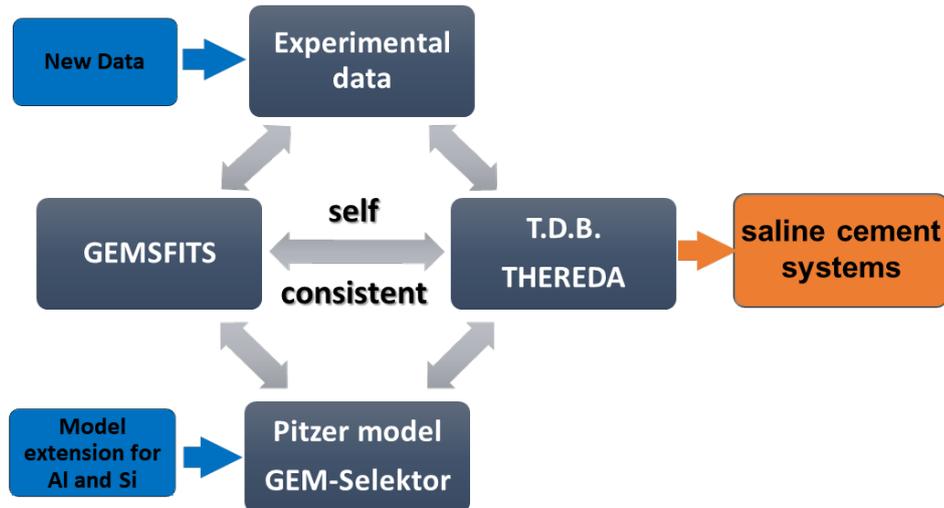


Fig. 9 Workflow for extending the Pitzer model with interaction parameters for Al and Si species consistent with the THEREDA database, for modeling of cementitious materials in highly saline systems. New selected experimental data will go into the experimental database, and the Pitzer model will be extended with necessary Al and Si species interactions. GEMSFITS will optimize the new interaction parameters against the experimental data to produce a consistent set of parameters, ready for modeling cementitious materials in saline systems.

The newly derived consistent Pitzer parameter dataset will support accurate modeling of equilibrium solid- and pore-water composition in hydrated (blended) cement materials in a wide range of conditions up to highly saline systems relevant for cement chemistry and for understanding waste-cement interactions. Having the thermodynamic properties of cement phases from Cemdata18 and the Pitzer model extended for simulating cementitious materials in highly saline systems will greatly expand the applicability of the THEREDA database and thus provide its users with a clear advantage.

Data gaps and research needs

Lack of experimental data for highly concentrated Si systems where polymeric species are relevant. At present, there is not enough data to derive a consistent set of polymeric species their temperature dependence and the Pitzer interaction parameters with other ions in solution (e.g. Na^+ , K^+ , Cl^- , SO_4^{2-}). Experimental data is needed to test the newly derived parameters up to the saturation of salts (e.g., NaCl , KCl , Na_2SO_4 , K_2SO_4 , CaCl_2 , MgCl_2) in systems containing C-S-H as well as other cement relevant phase assemblages.

The CASH+ model can model the uptake of cations, but no general mechanistic model is currently available to model the uptake of anionic species onto C-S-H. This is an important aspect, as it will affect the predicted phase assemblage in equilibrium with C-S-H. Using present equilibrium models will result in more anions (e.g., Cl^- , SO_4^{2-}) left in the aqueous solution while cations such as Na, K, Al go into C-S-H. This will have an effect on the equilibrium conditions for phases that contain these anions like AFm/AFt (mono-sulfate / Friedel's / Kuzel's / ettringite) that depend on the ratios of calcium, aluminum, sulfate and chloride available for reactions. To resolve this issue, a generic surface complexation model for Ca ions and anions (e.g., Cl^- , SO_4^{2-}) on C-S-H surfaces can be developed in GEMS and coupled with the CASH+ solid solution model.

At present in many codes such as GEMS and CemGEMS, modeling cementitious systems is limited to relatively low $IS < 1-2$ with the use of Debye-Hückel activity models. Combining THEREDA data for soluble salts with cemdata and the improved dataset of Pitzer interaction parameters will allow these tools to greatly improve on modelling various processes related to cement – salt interactions.

References

- Bethke, C.M., Farrell, B., Sharifi, M., 2017. *GWB Reaction Modeling Guide* 151.
- Chen, C.T.A., Marshall, W.L., 1982. Amorphous silica solubilities IV. Behavior in pure water and aqueous sodium chloride, sodium sulfate, magnesium chloride, and magnesium sulfate solutions up to 350°C. *Geochim Cosmochim Acta* 46, 279–287. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(82\)90255-1](https://doi.org/10.1016/0016-7037(82)90255-1)
- Elmer, T.H., Nordberg, M.E., 1958. Solubility of Silica in Nitric Acid Solutions. *Journal of the American Ceramic Society* 41, 517–520. <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1958.tb12907.x>
- Felmy, A.R., Schroeder, C.C., Mason, M.J., 1994. A solubility model for amorphous silica in concentrated electrolytes, in: *Symposium of Scientific Issues Related to Safety and Treatment of Hanford Waste Tanks*.
- Hummel, W., Berner, U., Curti, E., Pearson, F.J., Thoenen, T., 2002. Nagra/PSI Chemical Thermodynamic Data Base 01/01. *Radiochim Acta* 90, 805–813. https://doi.org/10.1524/ract.2002.90.9-11_2002.805
- Hummel, W., Thoenen, T., 2021. *The PSI Chemical Thermodynamic Database 2020*. Nagra Technical Report, NTB 21-03. Villigen, Switzerland.
- Kulik, D.A., 2011. Improving the structural consistency of C-S-H solid solution thermodynamic models. *Cem Concr Res* 41, 477–495. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2011.01.012>
- Kulik, D.A., Miron, G.D., Lothenbach, B., 2022. A structurally-consistent CASH+ sublattice solid solution model for fully hydrated C-S-H phases: Thermodynamic basis, methods, and Ca-Si-H₂O core sub-model. *Cem Concr Res* 151, 106585. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2021.106585>
- Kulik, D.A., Wagner, T., Dmytrieva, S. V., Kosakowski, G., Hingerl, F.F., Chudnenko, K. V., Berner, U.R., 2013. GEM-Selektor geochemical modeling package: Revised algorithm and GEMS3K numerical kernel for coupled simulation codes. *Comput Geosci* 17, 1–24. <https://doi.org/10.1007/s10596-012-9310-6>

Kulik, D.A., Winnefeld, F., Kulik, A., Miron, G.D., Lothenbach, B., 2021. CemGEMS – an easy-to-use web application for thermodynamic modeling of cementitious materials. RILEM Technical Letters 6, 36–52. <https://doi.org/10.21809/rilemtechlett.2021.140>

Lothenbach, B., Kulik, D.A., Matschei, T., Balonis, M., Baquerizo, L., Dilnesa, B., Miron, G.D., Myers, R.J., 2019. Cemdata18: A chemical thermodynamic database for hydrated Portland cements and alkali-activated materials. Cem Concr Res 115, 472–506. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2018.04.018>

Lothenbach, B., Matschei, T., Möschner, G., Glasser, F.P., 2008. Thermodynamic modelling of the effect of temperature on the hydration and porosity of Portland cement. Cem Concr Res 38, 1–18. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2007.08.017>

Lothenbach, B., Rentsch, D., Wieland, E., 2014. Hydration of a silica fume blended low-alkali shotcrete cement. Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C 70–71, 3–16. <https://doi.org/10.1016/j.pce.2013.09.007>

Lothenbach, B., Winnefeld, F., 2006. Thermodynamic modelling of the hydration of Portland cement. Cem Concr Res 36, 209–226. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2005.03.001>

Ma, B., Lothenbach, B., 2021. Synthesis, characterization, and thermodynamic study of selected K-based zeolites. Cem Concr Res 148, 106537. <https://doi.org/10.1016/J.CEMCONRES.2021.106537>

Ma, B., Lothenbach, B., 2020a. Synthesis, characterization, and thermodynamic study of selected Na-based zeolites. Cem Concr Res 135, 106111. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2020.106111>

Ma, B., Lothenbach, B., 2020b. Thermodynamic study of cement/rock interactions using experimentally generated solubility data of zeolites. Cem Concr Res 135, 106149. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2020.106149>

Marshall, W.L., 1980. Amorphous silica solubilities-III. Activity coefficient relations and predictions of solubility behavior in salt solutions, 0–350°C. Geochim Cosmochim Acta 44, 925–931. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(80\)90282-3](https://doi.org/10.1016/0016-7037(80)90282-3)

Marshall, W.L., Warakomski, J.M., 1980. Amorphous silica solubilities-II. Effect of aqueous salt solutions at 25°C. *Geochim Cosmochim Acta* 44, 915–924. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(80\)90281-1](https://doi.org/10.1016/0016-7037(80)90281-1)

Meyer, T., 2006. Geochemische Modellierung des Langzeitverhaltens von silikatischen und alumosilikatischen Materialien. *GRS – A – 3350*.

Meyer, T., Willms, T., 2008. Geochemische Modellierung des Langzeitverhaltens von silikatischen und alumosilikatischen Materialien im Temperaturbereich bis 90 ° C. *GRS – A – 3493*.

Miron, G.D., Kulik, D.A., Dmytrieva, S. V., Wagner, T., 2015. GEMSFITS: Code package for optimization of geochemical model parameters and inverse modeling. *Applied Geochemistry* 55, 28–45. <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2014.10.013>

Miron, G.D., Kulik, D.A., Lothenbach, B., 2022a. Porewater compositions of Portland cement with and without silica fume calculated using the fine-tuned CASH+NK solid solution model. *Materials and Structures* 2022 55:8 55, 1–13. <https://doi.org/10.1617/S11527-022-02045-0>

Miron, G.D., Kulik, D.A., Yan, Y., Tits, J., Lothenbach, B., 2022b. Extensions of CASH+ thermodynamic solid solution model for the uptake of alkali metals and alkaline earth metals in C-S-H. *Cem Concr Res* 152, 106667. <https://doi.org/10.1016/J.CEMCONRES.2021.106667>

Moog, H.C., Bok, F., Marquardt, C.M., Brendler, V., 2015. Disposal of nuclear waste in host rock formations featuring high-saline solutions - Implementation of a thermodynamic reference database (THEREDA). *Applied Geochemistry* 55, 72–84. <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2014.12.016>

Myers, R.J., Bernal, S.A., Provis, J.L., 2014. A thermodynamic model for C-(N-)A-S-H gel: CNASH-ss. Derivation and validation. *Cem Concr Res* 66, 27–47. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2014.07.005>

Parkhurst, D.L., Appelo, C. a. J., 2013. Description of Input and Examples for PHREEQC Version 3 — A Computer Program for Speciation , Batch-Reaction , One-Dimensional Transport , and Inverse Geochemical Calculations. U.S. Geological Survey Techniques and Methods, book 6, chapter A43, 497 p., Techniques and Methods, book 6, chapter A43. U.S. Geological Survey.

Pitzer, K.S., 1991. Activity coefficients in electrolyte solutions (2nd ed.).

Thoenen, T., Hummel, W., Berner, U.R., Curti, E., 2014. The PSI / Nagra Chemical Thermodynamic Database 12 / 07 417.

Voigt, W., 2015. What we know and still not know about oceanic salts. Pure and Applied Chemistry 87, 1099–1126. <https://doi.org/10.1515/pac-2015-0606>

Wagner, T., Kulik, D.A., Hingerl, F.F., Dmytrieva, S. v., 2012. GEM-Selektor geochemical modeling package: TSolMod library and data interface for multicomponent phase models. Can Mineral 50, 1173–1195. <https://doi.org/10.3749/canmin.50.5.1173>

Wilhelm, S., 2013. Polythermal thermodynamic data set for cement minerals and their reaction products THEREDA II - Final Report, AF-Consult Report, No. 1936/02, THEREDA.

Xu, B., Winnefeld, F., Ma, B., Rentsch, D., Lothenbach, B., 2022. Influence of aluminum sulfate on properties and hydration of magnesium potassium phosphate cements. Cem Concr Res 156, 106788. <https://doi.org/10.1016/J.CEMCONRES.2022.106788>

Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil 1 - Baustoffrezepturtypen und deren Eigenschaften

TU Bergakademie Freiberg, Institut für Anorganische Chemie, Salz- und Mineralchemie

Email: iris.paschke@chemie.tu-freiberg.de, daniela.freyer@chemie.tu-freiberg.de

Zusammenfassung

Die Rezeptureinstellung bzw. -entwicklung des Magnesiabaustoffs beginnt mit der Wahl und Qualitätsprüfung der Ausgangskomponenten und Festlegung des entsprechenden Verhältnisses MgO zu MgCl₂-Anmischlösung. Der daraus resultierende Rezepturtyp bedingt die geochemischen und geomechanischen Baustoffeigenschaften wie Abbindezeitprozess (Temperatur-Phasenbestands-, Druckentwicklung) sowie die mechanisch-hydraulischen Eigenschaften. Mit dem erreichten Stand von Wissenschaft und Technik kann der Magnesiabaustoff als nachweislich langzeitbeständiger Baustoff gezielt als Schacht-, Streckenverschluss oder Verfüllmaterial eingesetzt werden.

Einleitung

Magnesiabaustoff wird seit über 100 Jahren als Baustoff im Salinar eingesetzt. Die Bindemittelphasen sind basische Magnesiumchlorid-Hydrate ($x \text{ Mg(OH)}_2 \cdot y \text{ MgCl}_2 \cdot z \text{ H}_2\text{O}$ = x-y-z-Phasen), welche bei der Reaktion von Magnesiumoxid mit konzentrierter MgCl₂-Lösung entstehen und werden nach ihrem Entdecker [Sorel1987] als Sorel-Phasen bezeichnet. Je nach Baustoffrezeptur werden verschiedene Zuschläge wie Sand / Kies-Gemische, Gesteinsmehle oder Steinsalz, welche nicht an der Abbindereaktion beteiligt sind, eingesetzt.

Das erste Dammbauwerk unter Verwendung von Magnesiaement im Kalibergbau wurde um die Jahrhundertwende im ehemaligen Kaliwerk Leopoldshall in 300 m Tiefe in einer Steinsalzstrecke gegenüber 3,3 MPa Laugendruck errichtet. Der 161,5 m lange, sorgfältig mit dem Gebirge verzahnte Damm wurde mit Ziegelsteinen und Magnesiaementmörtel hergestellt [Glückauf 1902]. Obwohl der Magnesiaementmörtel empirisch angemischt wurde, erweist sich der errichtete Damm bis heute als dicht gegenüber dem hohen Lösungsdruck.

Das Verständnis und Wissen zum Baustoff beginnt mit den Ausgangsstoffen und Rezepturzusammensetzungen über den Abbindeprozess und endet bei den langfristig sich einstellenden Eigenschaften. Letztere beantworten die Fragestellungen zum hydraulischen und mechanischen Verhalten sowie der geochemischen Langzeitstabilität. Im letzten Jahrzehnt sind dazu zahlreiche und systematische Untersuchungen durchgeführt worden (siehe relevante FuE-Projekte in Tab. 2 am Ende dieses Beitrags).

So hängt die Bindemittelphasenbildung, mit welcher die Erhärtung des Baustoffs einher geht, von der Rezeptur, also dem Verhältnis des Bindemittels MgO zur MgCl₂-Anmischlösung sowie der Abbinde temperatur ab. Aussagen über die Langzeitstabilität der gebildeten Phase(n) nach Abschluss der Abbinde reaktion können mit Kenntnissen zu den Löslichkeitsgleichgewichten in Salzlösungen getroffen werden (siehe Beitrag Panach et al. 2023).

Baustoffrezepturen

Jede MgO-Baustoffrezeptur enthält, neben möglichen Zuschlägen, kaustisches MgO¹ als Bindemittel, welches mit der konzentrierten MgCl₂-Anmischlösung unter Bildung der x-y-z-Bindemittelphase(n) zu einem erhärtenden Gefüge ausreagiert. Das Molverhältnis von MgO:MgCl₂:H₂O, welches gezielt eingestellt werden kann, bestimmt dabei, welcher Bindemittelphasenbestand sich nach dem Abbindeprozess einstellt. Das heißt, dass z. B. 3 mol MgO + MgCl₂-Lösung mit 1 mol MgCl₂ und 11 mol Wasser zur Bildung der 3-1-8-Phase führen. Analog für die Bildung der 5-1-8-Phase. Werte dazwischen führen zur Bildung eines 3-1-8/5-1-8-Phasengemisches. Ist der MgO-Anteil höher als für die Bildung der 5-1-8-Phase notwendig, verbleibt Rest-MgO im ausgehärteten Baustoff. Ist weniger als 3 mol MgO enthalten, verbleibt Porenlösung im abgebundenen Baustoffgefüge. Grundsätzlich können daher alle Magnesiabaustoffrezepturen in die Rezepturtypen „3-1-8-Typ“ und „5-1-8-Typ“ eingeteilt werden. Bei den bekannten Rezepturen A1, DBM2 (B2) und C3 handelt es sich um einen 3-1-8-Typ, da das Molverhältnis MgO:MgCl₂:H₂O im Bereich von 3:1:11 im Rezepturansatz liegt. Bei der D4-Rezeptur handelt es sich um einen 5-1-8-Typ (Verhältnis MgO:MgCl₂:H₂O mit >5:1:11-13).

Tabelle 1 gibt für diese Rezepturen einen Überblick zur konkreten Zusammensetzung und deren großtechnischen Umsetzungen bzw. im Rahmen welcher FuE-Projekte sie untersucht wurden.

¹ Die dabei zu beachtenden Reaktivitätsbereiche sind ein gesonderter Untersuchungsbereich.

Tab. 1 Zusammensetzungen bekannter und großtechnisch verarbeiteter Magnesiabaustoffrezepturen.

Rezeptur	3-1-8 Rezepturtyp			5-1-8 Rezepturtyp	
	A1	DBM2 (B2)	C3	D4 (MB10)	
				Ortbeton	Spritzbeton
MgO	10,8-11,8 Ma%	10,5 Ma%	7 Ma% MgO	18,2 Ma%	15,6 Ma%
MgCl₂-Lsg.	24-26 Ma%	20,8 Ma%	16 Ma%	18,2 Ma%	11,5 Ma%
Zuschlag / Mehlkorn	62-65 Ma% Salzgrus	34,3 Ma% Sand 29,5 Ma% Anhydrit 4,5 Ma% Microsilica (amorphes SiO ₂)	65 Ma% Sand/Kies, (0-8 mm) 21 Ma% Quarzmehl (krist. SiO ₂)	63,6 Ma% Sand/Kies, (0-8 mm)	72,9 Ma% Sand/Kies, (0-8 mm)
Großtechnische Umsetzung	in der Asse; Halbdamm in Teutschenthal	Großversuch in Bleicherrode (im Auftrag des BfS)	Großbohrlochversuche (GBLV 1, 2) in Sonderhausen und Teutschenthal	in Teutschenthal	
				Großversuch (GV) 1	GV2
zugehörige FuE-Projekte:	ESA STROEFUN III	FKZ 02C1214 (Verbundprojekt: Weiterentwicklung von Magnesiabindern von der Strömungsbarriere hin zu einem Verschlusselement im Salinar - Hauptprojekt)	MgO-Projekt ELSA II MgO-C3	CARLA	CARLA MgO-SEAL MgO-S ³ MgO-Projekt

Die Abbindereaktion (Bildung der Bindemittelphase(n)) des Magnesiabaustoffes verläuft unabhängig von der jeweiligen Rezeptur exotherm. Bei der Verarbeitung als Massenbeton, wie in Ortbetonbauweise, können in der Bauwerksmitte Temperaturen im Bereich von 100 °C auftreten, weshalb der Abbindeprozess auch mit der Bildung einer Hochtemperaturphase einhergehen kann. Bei der Verarbeitung als Spritzbeton werden hingegen niedrigere Temperaturen (< 45 °C) erreicht, da der Beton schichtenweise (mit 10 - 20 cm Schichtdicke) aufgetragen wird.

Aufgrund des höheren Lösungsbedarf können 3-1-8-Rezepturen nur in Ortbetonbauweise verarbeitet werden. Der Rezepturtyp 5-1-8 ist als Ort- und Spritzbeton umsetzbar.

Eigenschaften – Phasenbestand, Druckverhalten, mechanische Parameter

Beim Abbindeprozess des Magnesiabaustoffes handelt es sich je nach Rezepturtyp um eine „2-Phasen-Abbindereaktion“ (3-1-8-Typ) bzw. „1-Phasen-Abbindereaktion“ (5-1-8-Typ).

Liegt im Rezepturansatz ein molares Verhältnis $MgO:MgCl_2:H_2O$ von etwa 3:1:11 (wie bei den Rezepturen A1, DBM2 und C3) vor, bildet sich 3-1-8-Phase. Deren Bildung ist kinetisch gehemmt, sodass temporär (kinetisch kontrolliert) auch die metastabile 5-1-8-Phase (Gl. 1) neben Porenlösung und amorphen Phasenanteilen gebildet werden kann. Bei Temperaturen $> 80\text{ °C}$ über mehrere Tage bildet sich zwischenzeitlich die Hochtemperaturphase 9-1-4 (Gl. 3). Mit der Abkühlung und Zeit erfolgt die Umwandlung der Primärphasen (5-1-8- bzw. 9-1-4-Phase) durch den Verbrauch der Porenlösung in die 3-1-8-Phase (Gl. 2 bzw. Gl. 4), der Einstellung des thermodynamischen Gleichgewichts folgend.



Die Porenlösung wird vollständig verbraucht, wenn kein Überschuss an Anmischlösung entsprechend dem 3:1:11-Rezepturansatz vorliegt. Ein Lösungsunterschuss führt zu einem anteiligen Verbleib der 5-1-8-Phase im Baustoffgefüge. Letzteres ist für den A1 im Rahmen der technologisch verarbeitbaren Rezepturschwankung nachgewiesen [ESA-Projekt]. Der Abbau amorpher Festphasenanteile unter Kristallisation der 3-1-8-Phase erfolgt generell sehr langsam. Im Rahmen der Forschungsprojekte „MgO-Projekt“ und „ESA“ wurde neben der Phasenbestandentwicklung auch das Druckverhalten (in speziellen Druckmesszellen) während des Abbindeprozesses verfolgt. **Abb. 1** zeigt die Messergebnisse für Abbinde maximaltemperaturen von 60 °C bzw. 120 °C . Der anfänglich gemessene Druckanstieg korreliert mit der Temperaturerhöhung und resultiert aus der thermischen Expansion des Probe- und Messzellenmaterials und ist mit Temperaturerniedrigung wieder rückläufig. Mit Einsetzen der Sekundärkristallisation der 3-1-8-Phase ist ein erneuter Druckanstieg zu beobachten, welcher bis zur vollständigen Umbildung der Primärphasen mit Porenlösung in die 3-1-8-

Phase anhält. Die Kristallisation der 3-1-8-Phase aus den Primärphasen ist mit einem Zuwachs des Festphasenvolumens verbunden und äußert sich im eingespannten Zustand des Baustoffes / Bauwerkes mit Druckentwicklung. Dieser sich entwickelnde Kristallisationsdruck ist aufgrund von Gefügerelaxation, dem Ausweichen des eigens aufgebauten Drucks in den mit dem Abbinden entstandenen Porenraum hinein, mit der Zeit wieder rückläufig. Erst nach Abschluss der Sekundärkristallisation ist die Abbindereaktion für den 3-1-8-Rezepturtyp abgeschlossen, was über mehrere Monate bis Jahre andauern kann.

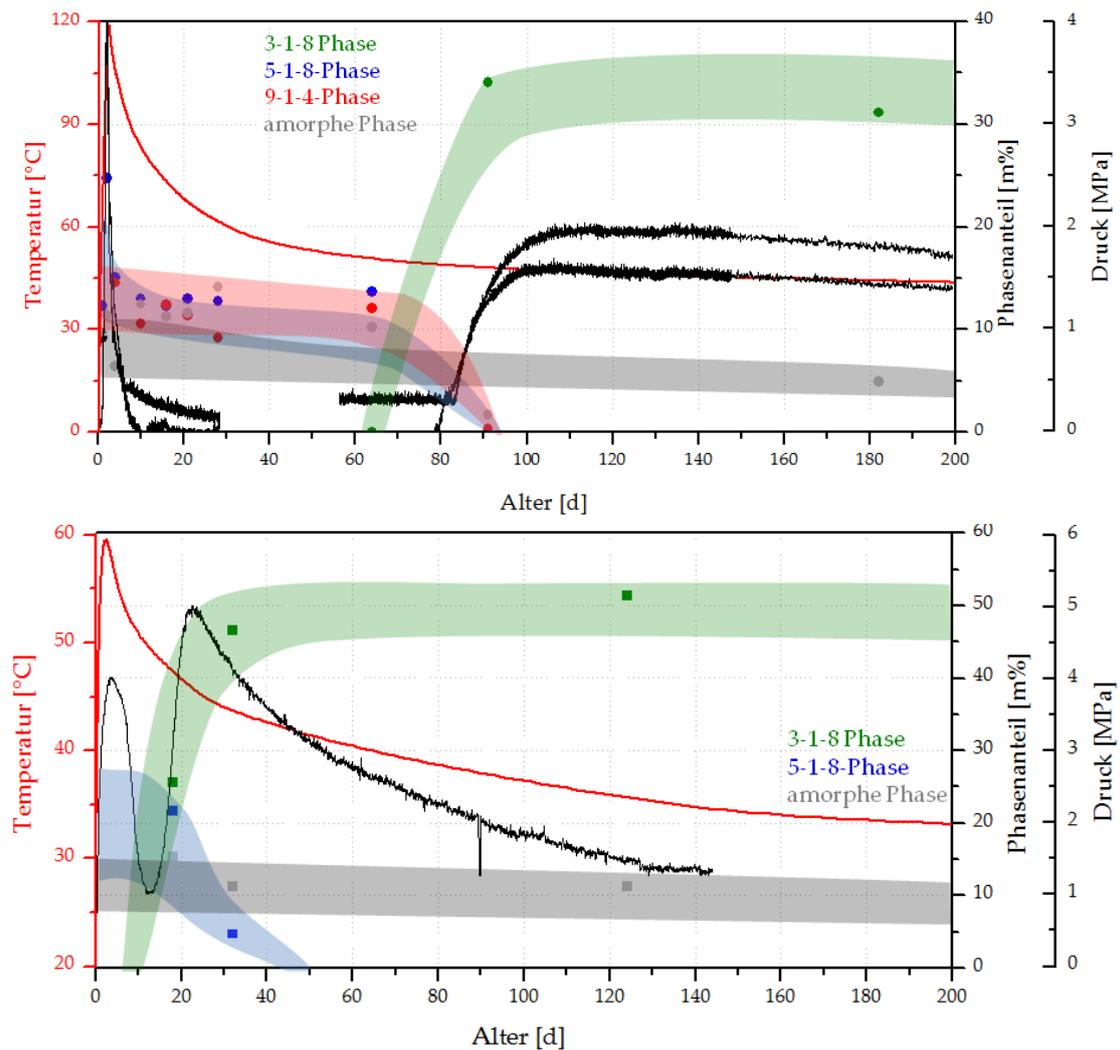
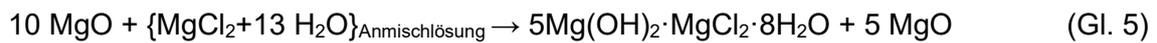


Abb. 1 Phasenbestandsentwicklung und Druckverlauf für Rezepturtyp 3-1-8 (oben: $T_{\max}=120^{\circ}\text{C}$; unten: $T_{\max}=60^{\circ}\text{C}$; bis 200 d nach dem Anmischen; Zuschlag nicht dargestellt).

Rezepturen vom Typ 5-1-8 können großtechnisch in Spritzbetonbauweise umgesetzt werden. Dabei werden vergleichsweise geringe Abbindemaximaltemperaturen erreicht.

Bei einem Molverhältnis $\text{MgO}:\text{MgCl}_2:\text{H}_2\text{O}$ mit $> 5:1:11$ (wie bei der D4-Rezeptur), liegt nach dem Abbindeprozess die 5-1-8-Phase neben Rest-MgO vor (Gl. 5, Abb. 2). Die vorhandene MgCl_2 -Lösung wird vollständig für die Bildung der 5-1-8-Phase verbraucht und es kommt zu keinen Sekundärreaktionen. Im Gegensatz zum 3-1-8-Rezepturtyp ist der Abbindeprozess des 5-1-8-Rezepturtyps bereits nach kurzer Zeit (Tagen) abgeschlossen.



Das neben dem Phasenbestand in Abb. 2 gezeigte Druckverhalten zeigt Konstanz, da es keine durch Sekundärkristallisation hervorgerufenen Volumenveränderungen gibt.

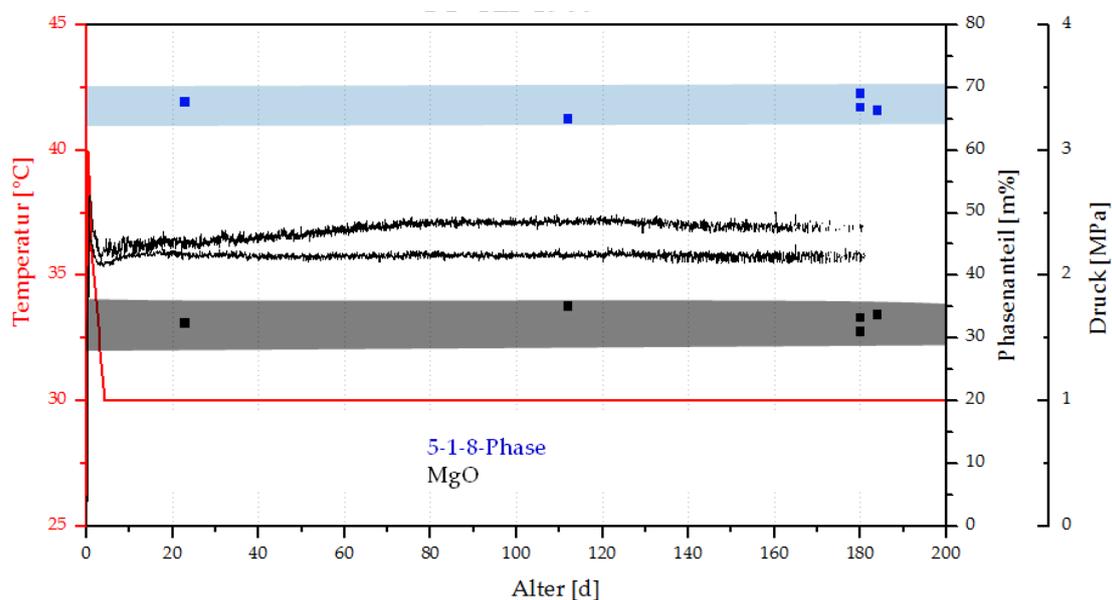


Abb. 2 Phasenbestandsentwicklung und Druckverlauf für Rezepturtyp 5-1-8 (D4) ($T_{\text{max}}=40^\circ\text{C}$; bis 200 d nach dem Anmischen; Zuschlag nicht berücksichtigt).

Erst bei einem weiteren Lösungskontakt (salinare Zutrittslösung) wird aus der 5-1-8-Phase bzw. aus noch vorhandenem MgO die 3-1-8-Phase gebildet. Die Umbildung der 5-1-8-Phase in die 3-1-8-Phase ist dabei mit einer Volumenzunahme an Festphase von 33,8 Vol% (unter Lösungsverbrauch) verbunden. Der im D4-Baustoff gemessene Porenraum ist z. B. deutlich kleiner, als durch den Volumenzuwachs ausfüllbar wäre. Deshalb entwickelt sich der Baustofftyp bei einem Lösungszutritt mit Initiierung der 3-1-8-Phasenbildung als lösungsunpermeabel, wenn er sich im eingespannten Zustand befindet. Es kann von einer Selbstabdichtung gesprochen werden. Bisher wurden Eindringtiefen von wenigen mm [MgO-SEAL] bis max. 1 cm [MgO-Projekt] über Monate bis Jahre gemessen [siehe Beitrag von Gruner et al. 2023].

Die unterschiedlichen Abbindeprozesse (ein- bzw. zwei-phasig) der Rezepturtypen bedingen Materialeigenschaften wie Festigkeit und Kriechverhalten des jeweiligen Magnesiabaustoffes.

Die experimentell bestimmten Festigkeiten des 5-1-8-Rezepturtyps weisen sehr hohe Werte auf (vgl. ultrahochfeste Betone), die der 3-1-8-Typen sind vergleichsweise geringer. Während mit der einphasigen Abbindereaktion der 5-1-8-Typen primär verwachsene 5-1-8-Kristallite zu sehr hohen Festigkeiten führen, bewirkt der 2-Phasen-Abbindeprozess der 3-1-8-Typen geringere Festigkeiten (langsames Kristallwachstum der 3-1-8-Phase den Gefügespannungen ausweichend). Dadurch weist der 3-1-8-Typ auch ein ausgeprägteres Kriech- und Relaxationsverhalten im Vergleich zum 5-1-8-Rezepturtyp auf. Nach bisherigem Kenntnisstand ist dieses grundlegend unterschiedliche mechanische Verhalten relativ unabhängig vom Zuschlag (ob z.B. Salzgrus oder Hartgesteinskörnung). In Abb. 3 ist das Rezeptur-Eigenschaftsbild des Magnesiabaustoffs schematisiert.

Rezepturtyp	„3-1-8“		„5-1-8“		
Zuordnung bekannter Rezepturen	← A1 → ← DBM2 → ← C3 →		← D4 (MB10) →		
Bindemittelphasen-ausbildung nach Abbinden	3-1-8 + Porenisg 3 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O (= Mg ₂ (OH) ₃ Cl · 4 H ₂ O)	3 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O + 5 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O	5 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O (= Mg ₃ (OH) ₅ Cl · 4 H ₂ O)	5 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O + MgO	
Molarer Ansatz MgO : MgCl ₂ : H ₂ O	< 3...	3 : 1 : 11	(3 - 5) : 1 : (11 - 13)	5 : 1 : 13	(>5) : 1 : 13
Ansatz Masse% MgO : MgCl ₂ : H ₂ O		29.18 : 22.98 : 47.84	29.18 - 37.95 : 22.98 - 17.93 : 47.84 - 44.11	37.95 : 17.93 : 44.11	>37.95 : 17.93 : 44.11
Geomechanische Eigenschaften					
Lösungspermeabilität (GG-Lösung)					
Geochemische Eigenschaften	Langzeitbeständigkeit bei Lösungszutritt (NaCl-gesättigt, MgCl ₂ -haltig) im eingespannten Zustand über thermodynamisches Gleichgewicht zwischen Bindemittelphase und Kontaktlösung als Integritätsnachweis: das im Bindemittelphasen-Lösungs-System metastabil existierende 5-1-8 Phasengefüge wird bei Lösungszutritt im Kontaktbereich durch die Kristallisation der 3-1-8 Phase eingeschlossen, da mit der Kristallisation gleichzeitig Lösungszugänglichkeiten verschlossen werden. Die Baustoffeigenschaften bleiben erhalten.				
Zuschläge	Zuschläge verschiedener Art und Körnung beeinflussen die geomechanischen Eigenschaften in gewissem Rahmen, bewirken aber keine grundlegenden Veränderungen. Die Zuschläge müssen sich inert gegenüber ablaufenden geochemischen Prozessen verhalten (z.B. Steinsalz (NaCl), Sand, Kies, kristallines Quarzmehl (SiO ₂), Anhydrit, Magnesit)				

← → : Schwankungsbreite bei großtechnischer Herstellung/Verarbeitung

Abb. 3 Allgemeines Rezeptur-Eigenschaftsbild des Magnesiabaustoffs (aus [Freyer et al. 2015] entnommen und aktualisiert).

Tab. 2 Überblick über relevante FuE-Projekte zum Stand von W&T.

Projekt	Laufzeit	FKZ (gefördert durch)	Rezeptur	Wesentliche Inhalte / Ergebnisse
MgO-Projekt Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Baustoffs	12/2010 – 09/2014	02E10880 (BMWi)	C3 (3-1-8-Typ) D4 (5-1-8-Typ)	- umfangreiches Laborprogramm anhand dessen ein grundlegendes Verständnis zu den Abbindereaktionen entwickelt wurde ⇒ Rezepturklassifizierung in 3-1-8- bzw. 5-1-8-Typ - Integritätsnachweis 5-1-8-Rezepturtyp
ESA Schachtanlage Asse II: Nachweis der Langzeitbeständigkeit für den Sorelbaustoff der Rezeptur A1	06/2011 – 06/2017	(BGE ehem. BfS)	A1 (3-1-8-Typ)	umfangreiches Laborprogramm zum Nachweis der Langzeitbeständigkeit der A1-Rezeptur unter in Bezugnahme sämtlicher Daten und Werte der bisher großtechnischen Umsetzungen
ELSA II Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle: Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	05/2013 – 08/2020	02E11193A/B (BMWi)	C3 (3-1-8-Typ)	- Realisierung von 2 Großbohrlochversuchen (GBLV 1 und 2) im Steinsalz ⇒ in situ Daten zum Abbindetemperatur- und Druckverlauf
STROEFUN III Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung III	01/2019 – 07/2022	02E11748A (BMWi)	A1-Variante (3-1-8-Typ)	Errichtung eines Halbdamms in Teutschenthal für strömungstechn. Funktionsnachweis
MgO-C3 MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar	12/2022 – 11/2025	02E12072A/B (BMUV)	C3 (3-1-8-Typ)	umfangreiches Laborprogramm zur systematischen Untersuchung des Zuschlagkorngerüsts (Hartgestein) auf die sofortige und langanhaltende Druckentwicklung

Projekt	Laufzeit	FKZ (gefördert durch)	Rezeptur	Wesentliche Inhalte / Ergebnisse
CARLA I + II Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leichtlöslichen Salzgestein (Carnallit) für UTD/UTV	10/2002 – 06/2010	02C0942, 02C1204 (BMBF)	D4 (5-1-8-Typ)	Demonstration der technologischen Machbarkeit durch Errichtung von 2 Bauwerken (GV1, GV2) in Ort- bzw. Spritzbetonbauweise mit 5-1-8-Rezepturtyp
MgO-SEAL MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl ₂ -Lösung	10/2015 – 03/2019	02E11435 (BMW i)	D4 (5-1-8-Typ)	Integritätsnachweis für ein Dammbauwerk mit 5-1-8-Rezepturtyp
MgO-S³ MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz	05/2019 – 03/2022	02E11769A (BMUV)	D4 (5-1-8-Typ)	- selektiver Rückbau des mit MgCl ₂ -Lösung angeströmtem Dammbauwerkes GV2 - Großspritzversuche unterschiedliche Spritzbetonrezepturen
DeSpriBi Demonstrationsbauwerk für eine Streckenabdichtung im Anhydrit aus Magnesiabaustoff als Spritzbeton und Bitumen/Asphalt	10/2022 – 09/2025	(BGE)	D4 (5-1-8-Typ)	Errichtung Demonstrationsbauwerk aus Spritzbeton in Bernburg

Literatur

[Freyer et al. 2015] Freyer, D.; Gruner, M. & Popp, T., *Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Betons*, Freiburger Forschungshefte E15 – Naturwissenschaften (2015).

[Glückauf 1902] *Wasserdichte Verdämmung im Steinsalzgebirge*. Glückauf (1902) 38 (14) 307 – 309.

[Gruner et al. 2023] Gruner, M., Popp, T.: *Großtechnische Versuche – Wissensstand zu den Materialeigenschaften Zement- und MgO-basierter Verschlussbaustoffe*. Beitrag Tagungsband AKB-Workshop “Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“, 05.-07.09.2023, Braunschweig.

[Pannach et al. 2023] Pannach, M., Paschke, I., Freyer, D.: *Magnesiabaustoff - Stand von W&T. Teil 2: Thermodynamische Berechnung der Beständigkeit im Wirtsgestein Salz (Stand THEREDA)*. Beitrag Tagungsband AKB-Workshop “Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“, 05.-07.09.2023, Braunschweig.

[Sorel 1867] Sorel, S., *Sur un nouveau ciment magnésien*, Hebd. Seances Acad. Sci. (1867) 65, 102-104.

1.7

M. Pannach, I. Paschke und D. Freyer:

**Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil 2 - Thermodynamische
Berechnung der Beständigkeit im Wirtsgestein Salz
(Stand THEREDA)**

TU Bergakademie Freiberg, Institut für Anorganische Chemie, Salz- und Mineralchemie

Email: melanie.pannach@chemie.tu-freiberg.de, daniela.freyer@chemie.tu-freiberg.de

Zusammenfassung

Mit dem erreichten Wissensstand,

einerseits

- zur Phasenbildung während des Abbindens und Erhärtens des Magnesiabaustoffs (= kinetisch kontrollierte Prozesse, siehe Beitrag Paschke et al. 2023, Teil 1),

und andererseits

- zu den Löslichkeitsgleichgewichten der Sorelphasen im System $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$ wie auch bei NaCl-Sättigung und deren thermodynamischen Berechenbarkeit mittels THEREDA

liegt eine fundierte wissenschaftliche Basis zur Anwendbarkeit des Magnesiabaustoffs als langzeitbeständiger Baustoff im Wirtsgestein Salz vor.

Die Langzeitbeständigkeit ist über die Löslichkeitsgleichgewichte der Sorelphasen (Bindemittelphasen des Baustoffs) in NaCl-gesättigten, MgCl_2 -haltigen Lösungen belegt und kann mittels THEREDA (Release geplant für Ende 2023) für verschiedene Lösungszusammensetzungen (Zutrittslösungen/Kontaktlösungen) nunmehr berechnet werden. Darüber hinaus ist mit den ebenfalls berechenbaren Protonenkonzentrationen, welche sich in den Zutritts- bzw. Kontaktlösungen einstellen, die pH-Pufferwirkung und damit das Radionuklid-Rückhaltevermögen über einen weiten Bereich von Temperatur- und Lösungskonzentrationen bewertbar.

Einleitung

An zementbasierte Verschlussbauwerke wird u.a. die Anforderung „geochemische Langzeitbeständigkeit“ gestellt. Diese Eigenschaft ist dann gegeben, wenn zwischen dem Baustoffphasenbestand und potentieller Kontaktlösung ein thermodynamisches Löslichkeitsgleichgewicht besteht. In diesem Fall ist der Baustoff korrosionsbeständig gegenüber der Kontaktlösung.

Magnesiabaustoff ist empirisch für seine Beständigkeit gegenüber Salz und salzhaltigen Lösungen bekannt. Er besteht aus Bindemittelphase(n), welche über die Abbindereaktion von kaustischem MgO und konzentrierten MgCl_2 -Lösungen entstehen. So können die Bindemittel-(Sorel-)Phasen 3-1-8, 5-1-8 und 9-1-4 je nach Magnesiabaustoff-Rezeptur und Abbinde temperatur [Freyer 2017] entstehen. Daneben existieren noch die Phasen 2-1-4, 2-1-2 und 3-1-0. Die Zusammensetzungen der Sorelphasen wurden mit der Bestimmung der Kristallstrukturen (3-1-8-Phase [de Wolff et al. 1953], 5-1-8-Phase [Sugimoto et al. 2007], 9-1-4-Phase [Dinnebier et al. 2010], 2-1-4-Phase und 2-1-2-Phase [Dinnebier et al. 2012], 3-1-0-Phase [de Wolff et al. 1954]) eindeutig geklärt. Neben den Bindemittelphasen können im Baustoff noch verschiedene Zuschläge enthalten sein.

Der wissenschaftliche Nachweis der geochemischen Langzeitbeständigkeit des Baustoffs kann über Löslichkeitsgleichgewichte der Sorelphasen mit Salzlösungen geführt werden (die Zuschläge müssen dabei inert gegenüber den Salzlösungen sein bzw. mit diesen ebenfalls im Gleichgewicht stehen). Die Löslichkeitsgleichgewichte sind temperaturabhängig und für MgCl_2 -Lösungen bei 25°C bis 120°C bekannt [Pannach et al. 2017]. In NaCl-gesättigten MgCl_2 -Lösungen liegen Daten bei 25°C und 40°C vor (Altmaier et al. 2003, Xiong et al. 2010, Pannach et al. 2023).

Potentielle Kontaktlösungen im Wirtsgestein Salz weisen komplexe Zusammensetzungen an Ionen des hexären Systems der ozeanischen Salze (Na^+ , K^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Cl^- , SO_4^{2-}) auf. Zur Berechnung der geochemischen Langzeitbeständigkeit des Magnesiabaustoffs gegenüber solchen komplexeren Lösungen werden in der Regel thermodynamische Modellrechnungen der Löslichkeitsgleichgewichte basierend auf dem Aktivitätskoeffizientenmodell nach Pitzer [Pitzer 1991] eingesetzt. Die für die Berechnungen nötigen Modelldaten, wie Löslichkeitskonstanten und Ionenwechselwirkungsparameter, werden aus vorhandenen experimentellen Daten oben genannter Lösungen binärer,

ternärer und quaternärer Untersysteme des hexären Systems der ozeanischen Salze, abgeleitet.

Allgemeine Kenngrößen des Löslichkeitsgleichgewichtes von Sorelphasen

Löslichkeitsdaten für Sorelphasen (Magnesiumchlorid-Hydroxid-Phasen) in Salzlösungen existieren in Form der Hydroxidionen- oder Protonenkonzentrationen in Abhängigkeit von der $MgCl_2$ -Lösungskonzentration. Die Bestimmung der Hydroxidionen-Konzentrationen entsprechend der Dissoziationsreaktion für (z.B.) die 3-1-8-Phase (Gl. 1) ist ein direkter Weg zur Quantifizierung dieser Löslichkeitsgleichgewichte. Die Kenntnis der zugehörigen Protonenkonzentrationen entsprechend (Gl. 2) hat für die Bewertung der pH-Puffer-Kapazität und somit dem Radionuklid-Rückhaltevermögen von $Mg(OH)_2$ und/oder den Sorelphasen bzw. des Magnesiabaustoffs noch besondere Bedeutung.



Die Löslichkeitskonstante K_L der 3-1-8-Phase errechnet sich für Reaktion (1) entsprechend Gleichung (3) bzw. (4) für Reaktion (2):

$$K_L = a(Mg^{2+})^4 \cdot a(Cl^-)^2 \cdot a(OH^-)^6 \cdot a(H_2O)^8 \quad (3)$$

$$K_L = [a(Mg^{2+})^4 \cdot a(Cl^-)^2 \cdot a(H_2O)^{14}] / a(H^+)^6 \quad (4)$$

mit $a = m_i \cdot \gamma_i$ a ...Aktivität; m ...Molalität [$mol \cdot (kg H_2O)^{-1}$]; γ ...Aktivitätskoeffizient

Eine Umrechnung der freien OH^- und der H^+ -Konzentration ineinander erfordert die Kenntnis des Ionenproduktes von Wasser in verdünnten bis in konzentrierte $MgCl_2$ -Lösungen [Pannach et al. 2023]. Zusätzlich zum freien OH^- existieren in basischen Systemen Hydroxid-Speziationen (wie z.B. $MgOH^+$ [Palmer et al. 1997]), welche zusammen die analytisch bestimmbare Gesamt- OH^- -Gleichgewichtskonzentration ergeben.

Löslichkeitsdaten im System $Mg(OH)_2$ - $MgCl_2$ - H_2O

Für das ternäre System $Mg(OH)_2$ - $MgCl_2$ - H_2O (= Magnesiumzement-Grundsystem) existiert mittlerweile ein umfangreicher OH^- -Löslichkeitsdatensatz im Temperaturbereich von 25°C bis 120°C (Abb. 1, [Pannach et al. 2017]), einschließlich einer Evaluierung früherer Angaben (20°C: [D'Ans et al. 1941], 25°C: [Robinson et al. 1909], 50°C: [Nakayama 1960], 100°C: [Nakayama 1959], 120°C: [Dinnebier et al. 2010]). Protonenkonzentrationen sind für dieses System bei 25°C, 40°C und 60°C bestimmt worden ([Pannach et al. 2023], Abb. 3).

Neben $Mg(OH)_2(s)$ existieren vier verschiedene Sorelphasen: 3-1-8, 9-1-4, 2-1-4 und 2-1-2 als thermodynamisch stabile Festphasen in Abhängigkeit von Temperatur und $MgCl_2$ -Konzentration [Pannach et al. 2017]. Die 3-1-8-Phase existiert zwischen $25^\circ C$ und $80^\circ C$, bei $100^\circ C$ nur noch metastabil. Die 9-1-4-, 2-1-4- und 2-1-2-Phase treten bei höheren Temperaturen und $MgCl_2$ -Konzentrationen auf. Im Allgemeinen steigt die Löslichkeit der Sorelphasen mit der Temperatur. Die ebenfalls bekannte 5-1-8-Phase wird bei Löslichkeitsbestimmungen gelegentlich zwischenzeitlich und damit als metastabil auftretende Phase im System beobachtet [Pannach et al. 2017].

Löslichkeitsdaten im System Na-Mg-Cl-OH-H₂O bei NaCl-Sättigung

Für das quaternäre System Na-Mg-Cl-OH-H₂O liegen mit den Löslichkeitsuntersuchungen bei $25^\circ C$ und $40^\circ C$ von [Pannach et al. 2023] die einzigen experimentellen Daten vor, in denen gleichermaßen die Hydroxidionen- (Abb. 2) und die Protonenkonzentrationen (Abb. 4) in NaCl-gesättigten $MgCl_2$ -Lösungen bestimmt wurden. Analog zum ternären System sind $Mg(OH)_2$ in verdünnten $MgCl_2$ -Lösungen und die 3-1-8-Phase in konzentrierteren Lösungen die stabilen Festphasen. Die 5-1-8-Phase tritt auch im quaternären System metastabil auf ([Xiong et al. 2010], [Pannach 2023]).

Löslichkeitskonstanten der Sorelphasen

Die Löslichkeitskonstanten für die Sorelphasen 3-1-8, 2-1-4 und 5-1-8 wurden anhand der gemessenen, molalen H^+ -Lösungskonzentrationen in den Gleichgewichtslösungen der Systeme $Mg(OH)_2$ - $MgCl_2$ - H_2O bei $25^\circ C$, $40^\circ C$ und $60^\circ C$ wie auch im quaternären System bei NaCl-Sättigung bei $25^\circ C$ bzw. $40^\circ C$ berechnet (entsprechend Gl. 4 am Bsp. Der 3-1-8-Phase). In Tab 1 sind diese Werte im Vergleich mit verfügbaren Literaturdaten zusammengefasst.

Tab. 1 Löslichkeitskonstanten ($\lg K_L$) der Sorelphasen 3-1-8, 5-1-8 und 2-1-4 im Vergleich zur Literatur. Die hervorgehobenen Werte dienten als Grundlage der Modellanpassung in [Freyer et al. 2023].

	T [°C]	System $Mg(OH)_2$ - $MgCl_2$ - H_2O		System Na-Mg-Cl-OH- H_2O		Mittelwert $\lg K_L$
		$\lg K_L \pm \sigma$	Quelle	$\lg K_L \pm \sigma$	Quelle	
3-1-8-Phase	25	-26,15±0,16	Altmaier et al. 2003	-26,16±0,13	Pannach et al. 2023	-26,1±0,2
		-26,10±0,13	Pannach et al. 2023			
	40	-24,72±0,04	Pannach et al. 2023	-24,88±0,16	Pannach et al. 2023	-24,8±0,2
	60	-23,04±0,11	Pannach et al. 2023		-	
5-1-8-Phase	25	-43,39±0,25	Pannach et al. 2023	-43,21±0,33	Xiong et al. 2010	-43,3±0,3
2-1-4-Phase	60	-32,95±0,20	Pannach et al. 2023		-	

Polytherme Berechnung der Löslichkeitsgleichgewichte

Anpassungen des THEREDA-Datensatzes

Der THEREDA-Datensatz (Release 2021) wurde auf Basis all dieser experimentellen Löslichkeitsdaten der Sorelphasen [Pannach et al. 2017, 2023] angepasst und erweitert [Freyer et al. 2023]:

- Gültigkeit der Temperaturfunktion der 3-1-8-Phase erweitert bis 100°C
- Gültigkeit der Temperaturfunktion der 2-1-4-Phase erweitert bis 120°C
- Temperaturfunktion für die 9-1-4-Phase implementiert (100°C-120°C)
- basische Lösungsspezies $\text{Mg}_3(\text{OH})_4^{2+}$ mit Temperaturfunktion implementiert (25°C-120°C)
- zugehörige Pitzer-Parameter überarbeitet

OH-Gleichgewichtskonzentrationen

Mit Hilfe des angepassten und erweiterten THEREDA-Datensatzes können die Löslichkeitsdaten von $\text{Mg}(\text{OH})_2(\text{s})$ und der Sorelphasen (3-1-8, 2-1-4, 9-1-4) übereinstimmend mit den experimentellen Daten berechnet werden. Abbildung 1 zeigt den Vergleich der experimentellen OH^- -Lösungskonzentrationen mit den berechneten Isothermen im System $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$ im Temperaturbereich von 25°C bis 120°C innerhalb der Streubreite der experimentellen Daten. Die 2-1-2-Phase wurde nicht ins Modell implementiert, da lediglich zwei Datenpunkte bei 120°C in sehr konzentrierten MgCl_2 -Lösungen vorliegen und deren Bildungsbedingungen für den Magnesiabaustoff wenig relevant sind.

Bei NaCl-Sättigung (System Na-Mg-Cl-OH-H₂O) beschreibt der erweiterte THEREDA-Datensatz das Löslichkeitsverhalten von $\text{Mg}(\text{OH})_2(\text{s})$ und der 3-1-8-Phase ebenfalls mit guter Genauigkeit, wie der Vergleich mit den experimentellen Daten bei 25°C und 40°C in Abb. 2 zeigt.

Die zusätzlich berechnete 50°C-Isotherme zeigt einen sinnvollen systematischen Trend, was eine etwas über den experimentellen Datenbereich hinausgehende zuverlässige Berechenbarkeit anzeigt.

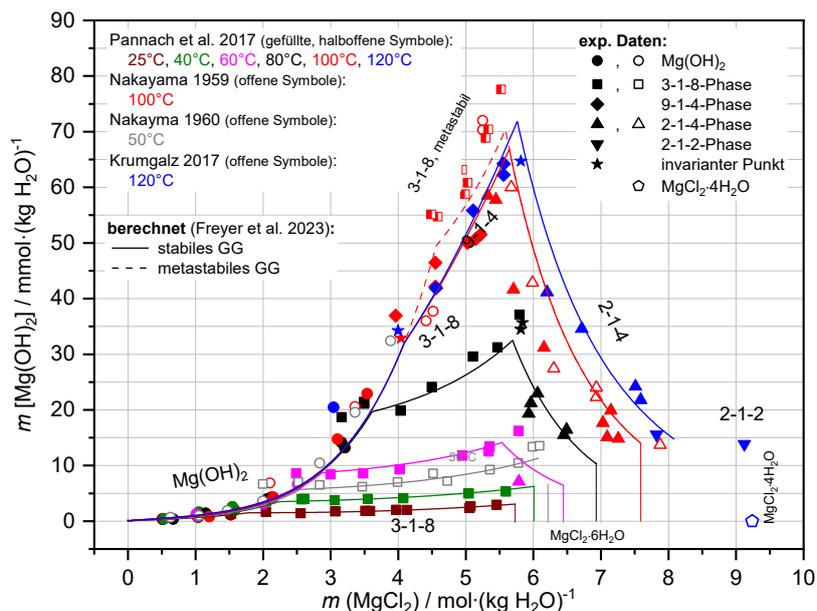


Abb. 1 Löslichkeitsdaten im ternären System $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$ bei 25°C - 120°C . Vergleich experimenteller Daten und berechneter Isothermen (erweiterter THEREDA-Datensatz).

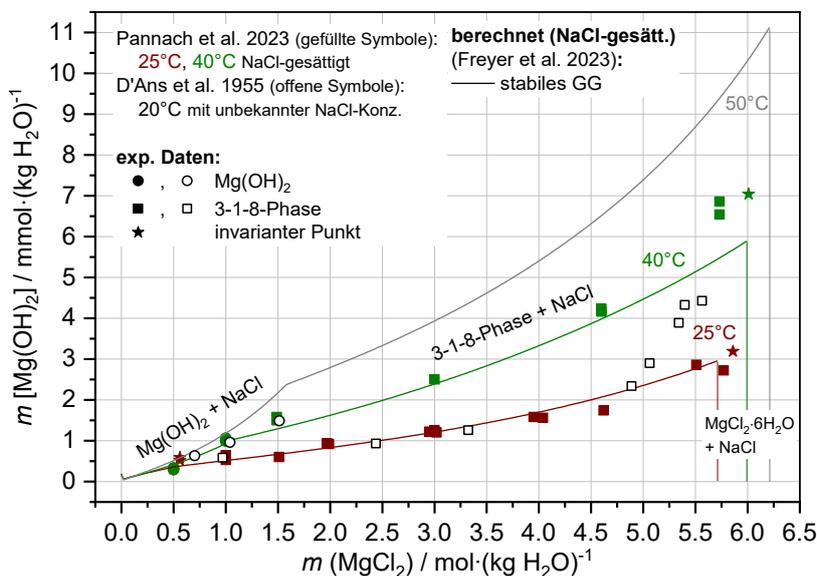


Abb. 2 Löslichkeitsdaten im quaternären System $\text{Na-Mg-Cl-OH-H}_2\text{O}$ bei NaCl -Sättigung. Vergleich experimenteller Daten und berechneter Isothermen (erweiterter THEREDA-Datensatz).

H⁺-Gleichgewichtskonzentrationen

Mit der Implementierung von erweiterten Temperaturfunktionen für die Sorelphasen 3-1-8, 2-1-4 und die metastabil auftretende 5-1-8-Phase in den THEREDA-Datensatz lassen sich nicht nur die Löslichkeitsgleichgewichte, sondern auch die H⁺-Gleichgewichtskonzentrationen in guter Übereinstimmung zu den experimentellen Daten berechnen. Abbildung 3 zeigt diesen Vergleich für das System Mg(OH)₂-MgCl₂-H₂O und Abbildung 4 für das System Na-Mg-Cl-OH-H₂O bei NaCl-Sättigung. Weitere berechnete Isothermen zwischen und oberhalb der Temperaturen der experimentellen Daten zeigen auch hier die zuverlässige Inter- und gewisse Extrapolierbarkeit an.

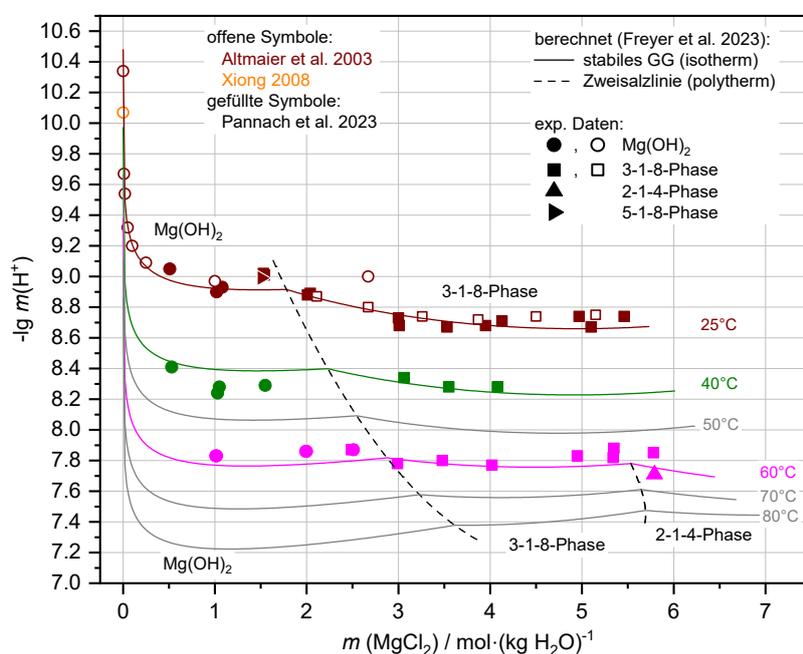


Abb. 3 Vergleich berechneter und experimenteller H⁺-Konzentrationen (logarithmiert) im ternären System Mg(OH)₂-MgCl₂-H₂O bei 25°C-80°C.

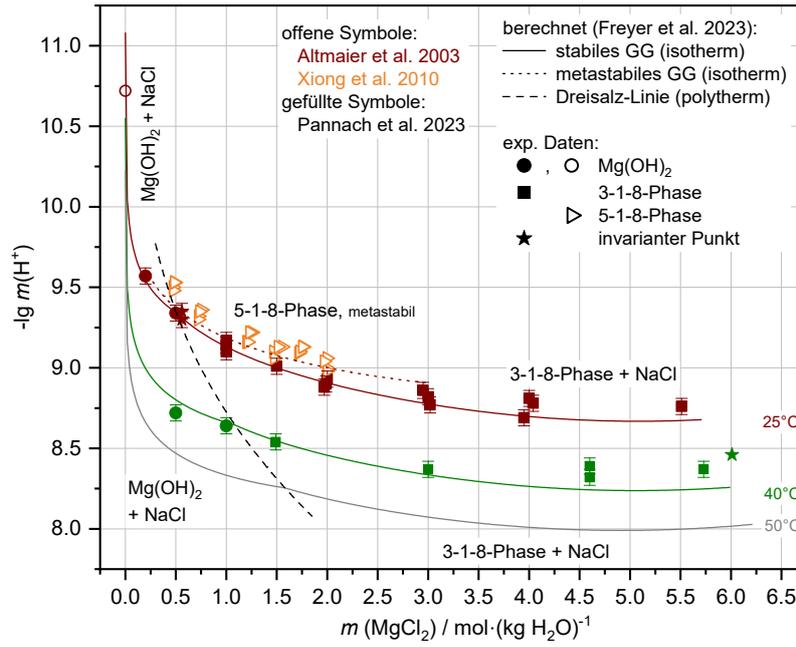


Abb. 4 Vergleich berechneter und experimenteller H⁺-Konzentrationen (logarithmiert) im quaternären System Na-Mg-Cl-OH-H₂O bei NaCl-Sättigung bei 25°C-50°C.

Literatur

- [Altmaier et al. 2003] Altmaier, M., Metz, V., Neck, V., Müller, R., Fanghänel, T.: *Solid-liquid equilibria of $Mg(OH)_2(cr)$ and $Mg_2(OH)_3Cl \cdot 4H_2O(cr)$ in the system Mg-Na-H-OH-Cl- H_2O at 25°C.* Geochim. Cosmochim. Acta (2003), 67(19), 3595-3601.
- [D'Ans et al. 1941] D'Ans, J., Katz, W.: *Magnesiumhydroxyd-Löslichkeiten, pH-Zahlen und Pufferung im System H_2O - $MgCl_2$ - $Mg(OH)_2$.* Zeitschrift für Kali-, Steinsalz- und Erdölindustrie (1941) 4, 37-41.
- [D'Ans et al. 1955] D'Ans, J., Busse, W., Freund, H.E.: *Basic magnesium chloride.* Kali Steinsalz (1955), 8, 3-7.
- [de Wolff et al. 1953] De Wolff, P.M., Walter-Lévy, L.: *The Crystal structure of $Mg_2(OH)_3(Cl,Br) \cdot 4H_2O$.* Acta Cryst (1953), 6, 40-44.
- [de Wolff et al. 1954] De Wolff, P.M., Kortlandt, D.: *Crystal structure determination from a x-ray powder diffraction pattern of β - $Mg_2(OH)_3Cl$.* Appl. Sci. Res. B3 (1954), 3, 400-408.
- [Dinnebier et al. 2010] Dinnebier, R.E., Freyer, D., Bette, S., Oestreich, M.: *$9Mg(OH)_2 \cdot MgCl_2 \cdot 4H_2O$, a high temperature phase of the magnesia binder system.* Inorg. Chem. (2010), 49(21), 9770-9776.
- [Dinnebier et al. 2012] Dinnebier, R.E., Oestreich, M., Bette, S., Freyer, D.: *$2Mg(OH)_2 \cdot MgCl_2 \cdot 2H_2O$ and $2Mg(OH)_2 \cdot MgCl_2 \cdot 4H_2O$, two high temperature phases I magnesia cement system.* Z. Anorg. Allg. Chem. (2012), 638(3-4), 628-633.
- [Freyer 2017] Freyer, D.: *10. Magnesia building material (Sorel cement) – from basics to application.* Aus: *Cementitious materials. Composition, properties, application.* Editor H. Pöllmann, Part III, p. 311-331 (deGruyter, 1. Auflage (2017), Berlin/Boston), doi:10.1515/9783110473728-011.

- [Freyer et al. 2023] Freyer, D., Pannach, M., Voigt, W.: *Solid-liquid equilibria of Sorel phases and $Mg(OH)_2$ in the system Na-Mg-Cl-OH- H_2O . Part II: Pitzer modeling*. Front. Nucl. Eng. (2023), accepted.
- [Nakayama 1959] Nakayama, M.: *A New Basic Triple Salt Containing Magnesium Hydroxide Part II. The Quinary System $KCl - MgCl_2 - Mg(OH)_2 - H_2O$ at $100^\circ C$* . Bull. Agr. Chem. Soc. Japan (1959) 23, 46-48.
- [Nakayama 1960] Nakayama, M.: *A New Basic Triple Salt Containing Magnesium Hydroxide Part III. The Quinary System $KCl - K_2SO_4 - MgCl_2 - MgSO_4 - Mg(OH)_2 - H_2O$ at $100^\circ C$* . Bull. Agr. Chem. Soc. Japan (1960) 24, 147-152.
- [Palmer et al. 1997] Palmer, D.A., Wesolowski, D.J.: *Potentiometric measurements of the first hydrolysis quotient of magnesium (II) to $250^\circ C$ and 5 molal ionic strength (NaCl)*. J. Solut. Chem. (1997), 26(2), 217-232.
- [Pannach et al. 2017] Pannach, M., Bette, S., Freyer, D.: *Solubility Equilibria in the System $Mg(OH)_2 - MgCl_2 - H_2O$ from 298 K to 393 K*. J. Chem. Ing. Data 2017, 62, 1384-1396.
- [Pannach et al. 2023] Pannach, M., Paschke, I., Metz, V., Altmaier, M., Voigt, W., Freyer, D.: *Solid-liquid equilibria of Sorel phases and $Mg(OH)_2$ in the system Na-Mg-Cl-OH- H_2O . Part I: experimental determination of OH^- and H^+ equilibrium concentrations and solubility constants at $25^\circ C$, $40^\circ C$ and $60^\circ C$* . Front. Nucl. Eng. (2023), DOI: 10.3389/fnuen.2023.1188789.
- [Paschke et al. 2023] Paschke, I., Freyer, D.: *Magnesiabaustoff – Stand von W&T. Teil I: Baustoffrezepturtypen und deren Eigenschaften*. Beitrag Tagungsband AKB-Workshop “Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“, 05.-07.09.2023, Braunschweig.
- [Pitzer 1991] Pitzer, K. S.: *Activity Coefficients in Electrolyte Solutions*. (1991) 2. Edition. Boca Raton. CRC Press.
- [Robinson et al. 1909] Robinson, W. O., Waggaman, W. H.: *Basic Magnesium Chlorides*. J. Phys. Chem. (1909) 13, 673-678.

[Sugimoto et al. 2007] Sugimoto, K., Dinnebier, R.E., Schlecht, T.: *Structure determination of $Mg_3(OH)_5Cl \cdot 4H_2O$ (F5 phase) from laboratory powder diffraction data and its impact on the analysis of problematic magnesite floors*. Acta Cryst. (2007), B63, 805-811.

THEREDA – *Thermodynamic reference database*. Release (2021). Verfügbar unter: www.thereda.de.

[Xiong et al. 2010] Xiong, Y., Deng, H., Nemer, M., Johnason, S.: *Experimental determination of the solubility constant for magnesium chloride hydroxide hydrate ($Mg_3Cl(OH)_5 \cdot 4H_2O$, phase 5) at room temperature, and its importance to nuclear waste isolation in geological repositories in salt formations*. Geochim. Cosmochim. Acta (2010), 74, 223-238.

Geotechnische Anforderungen an Verschlussbauwerke im Salinar

*Technische Universität Clausthal, Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme,
Clausthal-Zellerfeld, Deutschland*

uwe.duesterloh@tu-clausthal.de

Zusammenfassung

Der langfristig sichere Einschluss radioaktiver Abfälle in einem Endlager im Salinar ist gewährleistet, wenn die geologischen Barrieren in Verbindung mit den geotechnischen Barrieren gegen eine Migration von Flüssigkeiten und Gasen dauerhaft dicht sind. Voraussetzung dafür ist der Nachweis, dass die im Rahmen der Auffahrung untertägiger Hohlräume geschaffenen Verbindungen zwischen der Biosphäre und dem einschlusswirksamen Gebirgsbereich (ewG), d.h. Schächte, Strecken und Bohrungen durch geotechnische Barrieren ausreichend dicht verschlossen werden. Das Konzept der Endlagerung radioaktiver Abfälle im Salinargestein basiert auf der planmäßigen Verfüllung der nach Abfallablagerung verbleibenden Hohlräume mit Salzgrus und einer konvergenzgetriebenen Kompaktion des Salzgruses derart, dass langfristig der Salzgrus die mechanischen und hydraulischen Eigenschaften des umgebenden Salzgesteins annimmt. Bis zu diesem Zeitpunkt müssen zur Vermeidung eines Zutritts von Deckgebirgswässern in das Endlager bzw. eines Austritts kontaminierter Lösungen aus dem Endlager temporär wirksame Verschlussbauwerke errichtet werden. Die Funktionalität der Verschlussbauwerke muss in der Konsequenz gegeben sein für den Zeitraum zwischen dem Ende der Betriebsphase und der Verheilung der geologischen Barriere durch Kompaktion und Rekristallisation von Salzgrus zu Salzgestein. Eine Möglichkeit zur temporären Abdichtung der abgelagerten Abfälle bieten die im Rahmen des Workshops behandelten zementbasierten Verschlussbauwerke. Die begründete Zusammenstellung und Beschreibung der geotechnischen Anforderungen, die an Verschlussbauwerke im Salinar gestellt werden, ist Gegenstand des nachfolgenden Beitrages.

Einleitung

In seiner konstituierenden Sitzung am 29.05.2018 hat sich der Arbeitskreis Betonkorrosion (AKB) der Deutschen Arbeitsgemeinschaft Endlagerforschung (DAEF) zum Ziel gesetzt, den Stand von Wissenschaft und Technik im Bereich der Korrosion zementbasierter Verschlussbauwerke im Salinar zu dokumentieren und noch bestehende Defizite aufzuzeigen. Bearbeitet werden unter der Thematik Betonkorrosion vom AKB Fragestellungen

- a) zum Materialverhalten zementbasierter Baustoffe für Abdichtungen im Salinar (THMC-Materialeigenschaften, experimentelle Methoden, (stoff)-modelltheoretische Betrachtungen,
- b) zum Abdichtungssystemverhalten von zementbasierten Verschlussbauwerken im Salinar (Kontaktzone Baustoff/EDZ, in-situ Versuche, Laborversuche, THMC-Kopplungsprozesse) sowie
- c) zur Langzeitsicherheit eines Endlagersystems mit zementbasierten Abdichtungssystemen (relevante Prozesse, Prozessmodelle und ihre Integration in die LSA, rechnerische Analyse der LSA).

Der nachstehende Beitrag zum Thema "Geotechnische Anforderungen an Verschlussbauwerke im Salinar" ergänzt den gleichnamigen Vortrag, der anlässlich des Workshops "Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar" vorgetragen wurde. Ziel des Vortrages und damit auch der nachstehenden Ausführungen ist es, einen Überblick über die geotechnischen Anforderungen zu vermitteln, die an Verschlussbauwerke im Salinar gestellt werden. Der Überblick beschränkt sich ausdrücklich nicht auf eine nur aufzählende Zusammenstellung der aus wissenschaftlicher und ingenieurpraktischer Sicht gegebenen Anforderungen an Verschlussbauwerke im Salinar, sondern versucht begründet darzulegen, warum die einzelnen Anforderungen an die Verschlussbauwerke gestellt werden, wie und mit welchem Instrumentarium die Einhaltung und Erfüllung der Anforderungen gewährleistet werden kann, welche Ausgleichsmaßnahmen ggf. getroffen werden können oder erforderlich sind, wenn einzelne Anforderungen aufgrund der gegebenen Hohlraum- und/oder Endlagerkonfiguration nicht oder nur bedingt erfüllbar sind und wie durch die Kombination verschieden konzipierter Verschlussbauwerke die übergeordnete Zielstellung einer langfristig sicheren Isolation der abgelagerten Schadstoffe erreicht werden kann. Kritische Würdigung erfahren dabei insbesondere diejenigen Fragestellungen, die sich mit der Charakterisierung und Bewertung zementbasierter Verschlussbauwerke

befassen und für deren Beantwortung nach aktuellem Stand von Wissenschaft und Technik noch Defizite bestehen. Der aktuelle Stand von Wissenschaft und Technik bei der Planung und Ausführung geotechnischer Barrieren für Untertagedeponien im Salinargebirge kann dem im Mai 2021 veröffentlichtem Kompendium des Arbeitskreises Salzmechanik der DGGT entnommen werden /1/. Auch wenn das Kompendium sich ausdrücklich auf geotechnische Barrieren für Untertagedeponien beschränkt, d.h. Fragestellungen der Endlagerung radioaktiver, insbesondere wärmeentwickelnder Abfälle nicht berücksichtigt und spezielle Fragestellungen der zementbasierten Verschlussbauwerke nicht zum Inhalt hat, bleibt festzustellen, dass aufgrund gleichartiger Gebirgsformationen und gleichartiger materieller Schutzziele die Mehrzahl der geotechnischen Anforderungen an Verschlussbauwerke im Salinar unabhängig von der Art der abgelagerten Abfälle im Untertagedeponiebau und im Endlagerbau identisch sind. Vor diesem Hintergrund und da der Verfasser des vorliegenden Beitrages maßgeblich an der Erarbeitung des Kompendiums mitgewirkt hat, erfolgt die nachstehende Zusammenstellung der geotechnischen Anforderungen an Verschlussbauwerke in enger Anlehnung an /1/.

Besondere Charakteristika geotechnischer Verschlussbauwerke

Ein besonderes Charakteristikum geotechnischer Verschlussbauwerke ist, dass ihre Leistungsfähigkeit, Funktionsfähigkeit, Standsicherheit, Langzeitsicherheit und Integrität nicht unabhängig vom umgebenden Gebirge und auch nicht unabhängig von der lokationsspezifischen Einbausituation betrachtet und bewertet werden kann. Die Wirksamkeit der geotechnischen Barrieren zum Verschluss infrastrukturell notwendiger Zugangshohlräume ist bestimmt durch das Zusammenwirken der bautechnischen Konstruktion mit dem umgebenden Gebirge. In der Konsequenz müssen bei der Nachweisführung für eine geotechnische Barriere vor dem Hintergrund ihrer Funktion im Mehrbarrierenkonzept sowohl die in der bautechnischen Konstruktion als auch die im umgebenden Gebirge ablaufenden mechanischen, thermischen, hydraulischen und chemischen Prozesse entsprechend dem jeweiligen Stand der Technik betrachtet werden. Dabei stehen insbesondere diejenigen Prozesse im Vordergrund, die den anfänglichen Zustand einer geotechnischen Barriere im Lauf der Zeit hinsichtlich ihrer hydraulischen Wirksamkeit verschlechtern oder verbessern.

Die Analyse und Bewertung der Trag- und Dichtwirkung geotechnischer Barrieren hat angesichts der gegenüber sonstigen technischen Konstruktionen des Ingenieurbaus sehr großen Nachweiszeiträume sowohl für die aus einer wahrscheinlichen (→ planmäßigen) Entwicklung resultierenden Einwirkungen als auch für Einwirkungen aus Ereignisabläufen, die zwar weniger wahrscheinlich sind, angesichts der langen Nachweiszeiträume aber nicht vollständig ausgeschlossen werden können (→ außerplanmäßige/hypothetische Entwicklung) zu erfolgen.

Aus geomechanisch-geohydraulischer Sicht sind Verschlussbauwerke immer charakterisiert durch ein im Grundsatz viergliedriges Verbundsystem aus

- bautechnischer Konstruktion im offenen Grubengebäude,
- Kontaktzone zwischen bautechnischer Konstruktion und umgebenden Gebirge,
- Auflockerungszone und
- dem umgebenden Gebirge.

Hinzu kommt, dass geotechnische Barrieren und damit auch die zementbasierten Verschlussbauwerke nach ihrer bautechnischen Errichtung und der Stilllegung des Endlagers nicht hinsichtlich ihrer tatsächlichen Funktionalität überprüft werden können. An die ortskonkrete und aufgabenbezogene Planung und Nachweisführung sowie die bautechnische Ausführung und Qualitätssicherung sind damit grundsätzlich hohe Ansprüche zu stellen.

Geotechnische Anforderungen an Verschlussbauwerke im Salinar

Wesentlich für die Funktionalität und Integrität eines Verschlussbauwerkes im Salinar ist die Frage, ob und inwieweit Kontakt- und Auflockerungszone durch das infolge konvergenter Verformungen auf das Verschlussbauwerk aufkriechende Gebirge in Beanspruchungszuständen resultieren, die zu einer Rückbildung bzw. Verheilung der konturnahen Auflockerungszone führen oder ob sie ggf. durch Injektionsmaßnahmen abgedichtet werden können. In der Folge muss gezeigt werden, dass das Verschlussbauwerk in seiner Gesamtheit integral die geforderte Dichtigkeit bzw. hinreichend geringe Durchlässigkeit aufweist. Als grundlegende Anforderungen an die konzeptionelle Planung, an die Nachweisführung und an die bautechnische Ausführung von Verschlussystemen in Schächten und Strecken sind aus wissenschaftlicher Sicht zu nennen:

1. Verschlussbauwerke sind standort- und aufgabenspezifisch auszulegen.

Durch das Zusammenwirken im Mehrbarrierenkonzept ist dabei unabhängig vom Ort eines möglichen Flüssigkeitszutrittes sowohl ein Austritt von Schadstoffen aus den Einlagerungsbereichen wie auch ein Zutritt von Flüssigkeiten in die Einlagerungsbereiche zu verhindern (bidirektionale Auslegung). Konstruktives Abbild der Anforderung einer bidirektionalen Ausbildung von Verschlussbauwerken ist ihr spiegelsymmetrischer Aufbau.

2. Die konstruktive Auslegung der Verschlussbauwerke soll unter Berücksichtigung der lokationsbezogenen Eigenschaften des umgebenden Gebirges und der anstehenden Flüssigkeiten erfolgen.

Durch eine Anpassung der Verformungs- und Festigkeitseigenschaften der zementbasierten Baustoffe an das umgebende Gebirge kann z.B. eine als "weicher Einschluss" bezeichnete Konstruktion gewählt werden, bei der keine Unstetigkeiten im Verlauf der Spannungen und Verformungen im Übergangsbereich zwischen dem anstehenden Gebirge und dem Verschlussmaterial generiert werden. Vorteilhaft ist, wenn nach dem Abbinden des zementbasierten Baustoffes keine diskrete Trennfläche (Kontaktfuge) zwischen Baustoff und anstehendem Gebirge resultiert, sondern ein Verbund zwischen Baustoff und Gebirge generiert wird. Die potenziell durch das Bauwerk migrierenden Flüssigkeiten sollten nicht zu einer Korrosion des verwendeten Baustoffes führen (Korrosion = Reaktion des Baustoffs mit dem Strömungsfluid mit der Folge einer messbaren Veränderung seiner mechanischen und hydraulischen Eigenschaften). Kann eine Korrosion bzw. ein Abtrag des Baustoffs nicht ausgeschlossen werden, dann ist das Verschlussbauwerk nur als temporäre Abdichtung geeignet und unterliegt einem zu quantifizierenden Alterungs- und Schädigungsprozess (zeitabhängige Reduktion der Funktionalität).

3. Verschlussbauwerke sollten soweit möglich zu einem System kombiniert werden.

Das Verschlusssystem sollte über eine sofort wirksame Abdichtung zur Gewährleistung der Funktionalität innerhalb der ersten Jahre bis hin zu tausend Jahren nach Verschluss hinaus ein langfristig wirkendes Abdichtungselement beinhalten, das eine Verheilung der geologischen Barriere ermöglicht. Ein Grundsatz der konzeptionellen Planung und Errichtung von Verschlussbauwerken fordert die Verwendung langzeitstabiler Baumaterialien, d.h. von Materialien, für die durch ein natürliches Analogon belegt ist, dass sie über geologische Zeiträume langzeitstabil sind. Zu

diesen Materialien zählen nach aktuellem Stand der Technik Salzgestein und Salzgrus, Tongestein und Bentonit, Basaltschotter und Bitumen. Ob bzw. inwieweit auch artifiziell hergestellte Sorelbetone aufgrund ihrer zu natürlich anstehenden Salzgesteinen gleichartigen Mineralphasen als langzeitstabil definiert werden dürfen, ist nach Einschätzung des Verfassers durch die wissenschaftliche Community noch nicht abschließend festgelegt. In der Konsequenz ist zu entscheiden, ob und ggf. unter welchen Randbedingungen zementbasierte Baustoffe lediglich geeignet sind für die Errichtung temporärer Verschlussbauwerke oder auch konzeptionell geeignet sind, die Aufgaben einer langfristigen Abdichtung zu übernehmen.

Die Anforderung Verschlussbauwerke soweit möglich zu einem System zu kombinieren bedeutet, dass nicht jedes einzelne Verschlussbauwerk alle mit der auch langfristigen Integrität eines Endlagers verbundenen Anforderungen erfüllen muss, sondern im Sinne eines Mehrfachbarrierenkonzeptes das System aus Verschlussbauwerken geeignet sein muss, den langfristig sicheren Einschluss zu gewährleisten.

4. Zur insbesondere langfristigen Gewährleistung der Funktionalität sollten geotechnische Barrieren so ausgelegt werden, dass das Mehrbarrierensystem redundant und diversitär konfiguriert ist.

Eine redundante Auslegung des Mehrbarrierensystems zielt darauf ab, bei nicht planmäßigem Ausfall der Funktionalität eines Verschlussbauwerkes die Integrität und Sicherheit des Endlagersystems zu erhalten. D.h. vice versa, dass ohne die Forderung nach redundanter Auslegung des Systems von Verschlussbauwerken eine mathematisch nicht mögliche Ausfallwahrscheinlichkeit von 0% bzw. Funktionsunsicherheit von 100% für ein Verschlussbauwerk nachzuweisen wäre.

Die Anforderung nach einer diversitären Auslegung des Systems von Verschlussbauwerken erfolgt vor dem gedanklichen Hintergrund, dass auch für den Fall einer wenig wahrscheinlichen, aber grundsätzlich nicht vollständig ausschließbaren, konzeptionell bedingt eingeschränkten Funktionalität eines Verschlussbauwerkes die Funktionalität und Integrität des Verbundsystems aus Verschlussbauwerken durch eine alternative Verschlusskonzeption gewährleistet wird. D.h. wenn die eingeschränkte Wirksamkeit eines Verschlussbauwerkes nicht auf die planmäßige Qualität der Bauausführung, sondern auf eine Kombination aus Baumaterial, Gebirge und zusitzenden Lösungen zurückzuführen ist, soll die Ursache für die

eingeschränkte Wirksamkeit durch eine alternative Materialkombination eliminiert werden.

5. Um potenzielle Undichtigkeiten insbesondere im Bereich der Kontaktzone zwischen Verschlussbauwerk und umgebendem Gebirge auszuschließen, sollte eine Trennung von Dicht- und Tragfunktion erfolgen, die Kontaktzone ggf. durch Injektionsmaßnahmen vergütet und soweit möglich und zielführend die Auflockerungszone vor dem Einbau des Abdichtungselementes entfernt werden.
6. Die Dichtwirkung des Verschlusssystems sollte mit zunehmender Standzeit zunehmen.

Die nach Errichtung der Verschlussbauwerke erreichte Qualität bzw. Dichtigkeit des Systems sollte durch konvergenzinduzierte Kompaktionsprozesse und Spannungsumlagerungen ("Aufkriechen des Gebirges auf die Verschlusskonstruktionen") in der Tendenz in einer Reduktion der Porosität und Permeabilität resultieren.

7. Geotechnische Barrieren sind wartungsfrei auszulegen.

Ziel und Aufgabe der untertägigen Endlagerung radioaktiver Abfälle ist die nachsorgefreie Beseitigung der Abfälle aus dem Biozyklus, d.h. es ist konzeptionell nicht vorgesehen, die Abfallbeseitigungsanlagen nach Abschluss der Einlagerung zu überwachen und ggf. zu reparieren. Die Anforderung der Nachsorgefreiheit begründet sich zunächst in der gesellschaftlich und ethisch einvernehmlichen Erkenntnis, dass die Verantwortung für die ordnungsgemäße Beseitigung der mit der Nutzung eines Produktes verbundenen Abfallstoffe durch diejenigen Generationen zu erfolgen hat, die die Vorteile aus der Nutzung gehabt haben. Angesichts der Forderung nach einer langfristig sicheren Beseitigung (1 Mio. Jahre / geologische Zeiträume) ist allein aus finanziellen und organisatorischen Gründen sowie nicht vorhersagbaren gesellschafts-politischen Veränderungen eine Überwachung, Wartung oder Nachsorge der Abfallbeseitigungsanlagen nicht möglich (Vermeidung von Ewigkeitslasten).

8. Die flüssigkeitsdruckbezogene Auslegung von Verschlussbauwerken soll so erfolgen, dass mindestens ein dem Teufenniveau des Barrierestandortes entsprechender einseitig angreifender hydraulischer Flüssigkeitsdruck ohne Verlust der Funktionstüchtigkeit aufgenommen werden kann.

Der Lastfall eines einseitig auf das Verschlussbauwerk einwirkenden Flüssigkeitsdruckes in Höhe einer Fluidsäule zwischen Dammstandort und Tagesoberfläche definiert ingenieurtechnisch die maximal denkbare mechanisch-hydraulische Belastung des Verschlussbauwerkes. Ursächlich dafür, dass die bei Ansatz der erwarteten Normalentwicklung des Endlagers ggf. deutlich geringeren Belastungen der Verschlussbauwerke nicht als Grundlage für ihre Dimensionierung und Auslegung herangezogen werden, ist der geforderte Nachweiszeitraum von 1 Mio. Jahre. Die mit derartig großen Prognosezeiträumen verbundenen Unwägbarkeiten und Ungewissheiten bezüglich der geologischen, klimatischen und gesellschaftlichen Randbedingungen erlauben keine hinreichend verlässliche Vorhersage der in der Zukunft ablaufenden Prozesse.

9. Die für die bautechnische Konstruktion des Verschlussbauwerkes eingesetzten Baustoffe sollen hinsichtlich ihrer mechanischen, thermischen, hydraulischen und chemischen Eigenschaften quantitativ auf der Grundlage geeigneter Laboruntersuchungen charakterisiert werden. Art und Umfang der Laboruntersuchungen sollten geeignet sein, das Streubreitenband der Materialeigenschaften zu berücksichtigen und geeignete Materialparameter im Sinne der Bewertungsaussage zu belegen. Die Materialeigenschaften sollen durch geeignete Stoffmodelle beschrieben werden.

Eine Berücksichtigung der relevanten Prozesse im Rahmen der rechnerischen Prognose und Analyse des Trag- und Dichtheitsverhaltens (physikalische und chemische Modellierung) sind nur möglich, wenn das THMC-gekoppelte Materialverhalten der (zementbasierten) Baustoffe bekannt ist und für die regelmäßig prognostisch durchzuführenden numerischen Berechnungen durch geeignete Stoffmodelle beschrieben werden kann.

10. Die für die bautechnische Konstruktion eingesetzten Baumaterialien sollen gegenüber den möglicherweise eindringenden Flüssigkeiten hinreichend korrosions- und temperaturbeständig sein.

Durch geeignete Labor- und Felduntersuchungen ist gegenständlich und vor Errichtung der Verschlussbauwerke zu belegen, dass weder die potenziell einwirkenden Fluide noch die aus der Restaktivität der abgelagerten Abfälle resultierenden Temperaturen oder eine Kombination aus beiden zu einer nachteiligen Veränderung der Materialeigenschaften (Festigkeit, Verformbarkeit, Porosität, Permeabilität, etc.) führt.

11. Es sollen bevorzugt Baumaterialien verwendet werden, deren Langzeitbeständigkeit und -verträglichkeit mit dem umgebenden Gebirge durch natürliche Analoga prinzipiell belegbar sind.

Salzlagerstätten sind vor 230 bis 270 Mio. Jahren entstanden. Ungeachtet der Wasserlöslichkeit von Salzgesteinen ist die Langzeitbeständigkeit von Salzgesteinen somit durch ein natürliches Analogon (die Existenz von Salzlagerstätten) belegt. Eine im Grundsatz gleiche Aussage gilt für Ton- und Basaltgesteine (z. B. infolge Vulkanismus vor ca. 18 Mio. Jahre durch die flach gelagerten Salzlagerstätten des Werragebietes getretene Basaltschlote; Vorhandensein des roten und grauen Salztons innerhalb der Salinarfolgen). Für die Altersdatierung einer natürlichen Bitumenlagerstätte wird gemäß Literatur ein Zeitraum von 150 - 200 TSD Jahre genannt. Basierend auf den v.g. Beispielen können die Langzeitbeständigkeit und auch die Langzeitverträglichkeit der genannten Gesteine mit dem umgebenden Gebirge durch natürliche Analoga vergleichsweise einfach belegt werden. Ob und inwieweit artifizielle Baustoffe - und hierzu gehören die zementbasierten Verschlussmaterialien - eine Langzeitbeständigkeit und Langzeitverträglichkeit mit dem umgebenden Gebirge besitzen ist dagegen nicht bzw. nicht unmittelbar durch ein Analogon nachweisbar. Durch chemische und kristallographische Untersuchungen kann gezeigt werden, ob und unter welchen Voraussetzungen durch artifizielle Prozesse erzeugte Verschlussbaustoffe (zementbasierte Baustoffe) einen thermodynamisch stabilen Endzustand erreichen und damit die Anforderungen an Langzeitbeständigkeit und Langzeitverträglichkeit mit dem umgebenden Gebirge erfüllen. Ist dies nicht nachweisbar, erfolgt auf der Basis von Korrosionsversuchen eine Abschätzung der zeitlichen Beständigkeit und Verträglichkeit der Baustoffe mit dem umgebenden Gebirge. Abhängig von den Relationen zwischen Verschlussbauwerkslänge und Baustoffvolumen, den zuzitenden Fluiden und ihrer ggf. zeitlich veränderlichen chemischen Zusammensetzung, der zeitlich veränderlichen Porositäten, Permeabilitäten und Strömungsvolumina, etc. wird dann eine temporäre Beständigkeit und/oder Verträglichkeit der Verschlussbauwerke mit dem umgebenden Gebirge berechnet. Die temporäre Beständigkeit und Verträglichkeit mit dem umgebenden Gebirge muss im Sinne des Systems aus Verschlussbauwerken in diesen Fällen geeignet sein, die Integrität und Sicherheit des Endlagersystems bis zum Wirksamwerden der langfristig wirkenden Abdichtungselemente bzw. bis zur Verheilung der geologischen Barriere zu gewährleisten.

12. Der Standort des Verschlussbauwerkes soll sich in einem möglichst homogenen und tektonisch weitgehend unbeeinflussten Gebirgsbereich befinden.

Grundsätzlich gilt, je homogener und je weniger tektonisch beeinflusst das umgebende Gebirge am Standort des Verschlussbauwerkes aufgebaut ist, desto geringer ist der versuchstechnische und rechentechnische Aufwand für die Nachweise zur Funktionalität und Sicherheit der Verschlussbauwerke und desto geringer sind insbesondere auch die im Rahmen der prognostischen Berechnungen zu berücksichtigenden Unsicherheiten.

13. Die integrale Permeabilität des Verschlussbauwerkes sollte aus hydraulischer Sicht möglichst der Größenordnung der Permeabilität des umgebenden, unverritzten Salinargebirges entsprechen.

Aufgrund natürlicher Analoga wird davon ausgegangen, dass das unverritzte Salzgebirge dicht ist gegenüber Flüssigkeiten und Gasen. Sofern die integrale Permeabilität des Verschlussbauwerkes der Permeabilität des umgebenden unverritzten Gebirges entspricht, ist ein Zustand erreicht, der bezüglich der hydraulischen Durchlässigkeit dem Zustand vor der Auffahrung der Hohlräume entspricht und folglich die Integrität des Endlagersystems am Standort gegeben ist. Ist die integrale Permeabilität am Standort größer als die des unverritzten Gebirges, dann müssen die Konsequenzen der erhöhten Durchlässigkeit bezüglich der Sicherheit und Integrität des Gesamtsystems analysiert werden.

14. Angesichts der Wechselwirkung zwischen bautechnischer Konstruktion und umgebendem Gebirge muss die Nachweisführung standortbezogen erfolgen.

Das thermomechanisch-hydraulisch gekoppelte Tragverhalten des Verschlussbauwerkes ist nicht unabhängig vom thermomechanisch-hydraulisch gekoppeltem Tragverhalten des umgebenden Gebirges. D.h. abhängig vom Kriechverhalten des Gebirges resultiert die zeitlich-räumliche Entwicklung der auf das Verschlussbauwerk einwirkenden Beanspruchungen. Abhängig von den auf das Verschlussbauwerk einwirkenden Beanspruchungen reagiert das Verschlussbauwerk mit Verformungen und einem reaktiv auf das Gebirge (zurück-)wirkenden Stützdruck (→ Aktio = Reaktio). Die aus diesen Wechselwirkungen resultierenden Beanspruchungen sind in Verbindung mit den Festigkeiten von Gebirge einerseits und Verschlussbauwerk andererseits ursächlich für eine Über- oder Unterschreitung der Tragfähigkeit und damit ggf. für eine Änderung der Porosität und Permeabilität.

15. Für eine hinreichend präzise Einschätzung der rheologischen Eigenschaften des anstehenden Gebirges sollen im Bereich der geplanten Verschlussbauwerke rechtzeitig vor Einbau geeignete in-situ-Messungen durchgeführt werden. Dabei hat der Schutz der umgebenden geologischen Barriere bzgl. ihres Integritätsverlusts Vorrang.

Das Trag- und Dichtigkeitsverhalten des Verbundsystems aus Verschlussbauwerk und umgebenden Gebirge wird wesentlich bestimmt durch die Festigkeits- und Verformungseigenschaften des umgebenden Gebirges. Diese können und werden im Rahmen von Laborversuchen an Prüfkörpern regelmäßig ermittelt. Dessen ungeachtet wird das Verformungsverhalten am Standort des Verschlussbauwerkes wesentlich auch durch den anstehenden Spannungszustand bestimmt. Der anstehende Spannungszustand resultiert aus dem vor der Auffahrung des Standortes des Verschlussbauwerkes anstehenden Primärspannungszustand, der nicht genau bekannt ist und daher abgeschätzt werden muss und der aus dem Ausbruch des Hohlraumes resultierenden Umlagerungsspannungen (\rightarrow Sekundärspannung = Primärspannung + Umlagerungsspannung). Eine frühzeitige Messung der Konvergenz am Standort des Verschlussbauwerkes ist Voraussetzung für eine Validierung der Berechnungsergebnisse zum Trag- und Verformungsverhalten für den Zeitraum vor dem Einbau des Verschlussbauwerkes. Durch einen Vergleich der numerisch berechneten Verformungen mit den insitu gemessenen Verformungen können die für prognostische Analysen verwendeten numerischen Modelle insoweit validiert werden, als die aus dem großräumigen Tragverhalten resultierenden Ungewissheiten bzgl. des Tragverhaltens am Standort durch eine Optimierung der Kriechparameter weitgehend eliminiert werden können.

16. Die bautechnische Machbarkeit ist zu belegen.

Eine grundlegende Voraussetzung für die Funktionalität der Verschlussbauwerke ist ihre planmäßige und fehlerfreie Errichtung. Angesichts der hohen Anforderungen an die geometrischen Abmessungen und die einzuhaltende Oberflächenprofilierung einerseits und den zeitlichen Ablauf von Schalung, Betonierung und ggf. Instrumentierung muss die bautechnische Machbarkeit vor Errichtung der finalen Verschlussbauwerke belegt und geprüft werden. Von besonderer Bedeutung hierbei ist eine umfassende Dokumentation der einzelnen Arbeitsschritte, da vor dem Hintergrund der üblicherweise langen Verfahrenslaufzeiten nicht sichergestellt werden kann, dass das Personal und die Gerätschaften, die für den Nachweis der bautechnischen

Machbarkeit eingesetzt wurden, auch noch bei der Erstellung der finalen Verschlussbauwerke verfügbar sind.

17. Da Verschlussbauwerke nach ihrer bautechnischen Errichtung und nach Stilllegung des Endlagers nicht hinsichtlich ihrer tatsächlichen Funktionstüchtigkeit überprüft werden können, sollte aus wissenschaftlicher Sicht die Funktionalität des Abdichtungskörpers am Standort der Untertagedeponie in einem hinsichtlich der geologischen Verhältnisse repräsentativen Gebirgsbereich exemplarisch belegt werden.

Bei vergleichbaren Randbedingungen ist auch eine Übertragung geeigneter Konzepte von anderen Standorten möglich. Dabei abzuwägen ist jedoch, dass

- a) Demonstrationsversuche in situ vergleichsweise zeit- und kostenintensiv sind,
 - b) Demonstrationsversuche in situ keine Möglichkeit bieten, durch wiederholende Untersuchungen unter konstanten Beanspruchungsrandbedingungen die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse bzw. die Zuverlässigkeit eines Verschlusskonzeptes zu belegen,
 - c) Demonstrationsversuche in situ nicht geeignet sind, die Sensitivität eines Verschlussystems gegenüber variierten Last- und Widerstandsgrößen zu untersuchen, insbesondere nicht wegen des sehr langfristig ablaufenden Konvergenzprozesses unter den in situ möglichen Fluiddrücken und
 - d) ein als geeignet eingeschätztes Verschlussystem hinsichtlich seiner Funktionalität und Wirksamkeit nur eingeschränkt prüfbar ist, d.h. die abschließende Sicherheitsaussage auf der Annahme basiert, dass die im Rahmen eines Demonstrationsversuches belegte Funktionalität bei wiederholter Ausführung an einer anderen Lokation am Standort in gleicher Qualität und Wirksamkeit gegeben ist.
18. Der Zeitraum für die Nachweisführung (auch rechnerisch) zum Beleg von Standsicherheit und Dichtigkeit eines Verschlussbauwerkes soll die Zeitspanne seines planmäßig vorgegebenen Funktionszeitraumes umfassen.

D.h. die Nachweisführung muss mindestens den Zeitraum erfassen, bis zu dem durch Konvergenzprozesse die geologische Barriere wieder verheilt ist und den sicheren Einschluss der Abfälle gewährleistet.

19. Die zur Gewährleistung einer planmäßigen Funktionalität der Abdichtungsbauwerke geforderten materialtechnischen und bautechnischen Anforderungen sollen durch ein die Baumaßnahme begleitendes Qualitätsmanagementsystem geprüft und dokumentiert werden.

Da eine abschließende Funktionalitätsprüfung bei Verschlussbauwerken nicht möglich ist, basieren die Aussagen zur Leistungsfähigkeit und Funktionalität der Verschlussbauwerke im Wesentlichen auf der weitgehend exakten Wiederholung von Bauabläufen und verwendeten Materialien. In der Konsequenz sind die im Rahmen des QS-Systems zu dokumentierenden Nachweise einer weitgehend exakten Wiederholung der Bauabläufe einer Verwendung gleicher Materialien und Materialmischungen unverzichtbar für den (indirekten) Nachweis der Funktionalität.

20. Die Funktionalität des Verschlussbauwerkes im Verbund mit dem Gebirge sollte durch geeignete Untersuchungen im Technikumsmaßstab zur Reduktion von Maßstabeffekten und zur Berücksichtigung der Sensitivität gegenüber wahrscheinlichen Streuungen in den Last- und Widerstandsgrößen mit dem Ziel einer Steigerung von Zuverlässigkeit und Reproduzierbarkeit qualifiziert werden.

Ob und inwieweit die unter (1) bis (19) zusammengestellten grundsätzlichen Anforderungen in jedem Einzelfall erfüllt werden können, ist abhängig von den Möglichkeiten des jeweiligen Standes der Technik, den aufgaben- und standortspezifischen Anforderungen, der nicht normierbaren geologischen Gesamtsituation und dem Nachweiskonzept, d.h. insbesondere der Frage danach, welche Aufgaben die Verschlussbauwerke innerhalb des Mehrbarriersystems zur Gewährleistung des langfristigen und nachsorgefreien Einschlusses der Abfälle im Salzgebirge zu erfüllen haben.

Ausgeführte in-situ-Versuche zur Machbarkeit und Funktionalität von Verschlussystemen bzw. Teilaspekten z.B. in Teutschenthal (CARLA) und im Rahmen der Stilllegung des ERA Morsleben haben gezeigt, dass eine unmittelbare Übertragung der an kleinmaßstäblichen Prüfkörpern ermittelten Erkenntnisse zum thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischen Verhalten einzelner Abdichtungskomponenten auf die in situ zu errichtende Bauwerksdimension nur begrenzt möglich ist. Zu berücksichtigen ist, dass sich beispielsweise bedingt durch den Maßstabeffekt die Verhältnisse zwischen Bauwerksoberfläche und Bauwerksvolumen beim Übergang von kleinmaßstäblichen Laborversuchen auf insitu-Bauwerksdimensionen

verschieben können und in der Folge auch die im Labormaßstab ermittelten physikalischen Prozesse nur begrenzt übertragbar sind. Darüber hinaus sind auch bautechnische Einflussfaktoren, d.h. die gegenüber den Laboruntersuchungen abweichenden Herstellungsbedingungen zu berücksichtigen.

Vor dem vorstehend skizzierten Hintergrund ist zu empfehlen, die mit (1) bis (19) spezifizierte Liste der in der Literatur genannten Anforderungen an geotechnische Bauwerke durch Position (20) zu ergänzen.

Troubleshooting

Für die weitere Qualifizierung zementbasierter Verschlussbauwerke im Salinar können aus der vorstehend skizzierten Zusammenstellung der geotechnischen Anforderungen als Arbeits- bzw. Forschungsaufgaben insbesondere ausgewählt werden:

- Versuchstechnische Analyse des THM-Verhaltens im Kontaktbereich zwischen dem Baustoff des Verschlussbauwerkes und dem anstehenden Salzgestein. Die Untersuchungen sollten geeignet sein, die zeitlich räumliche Entwicklung des Beanspruchungszustandes, d.h. der allgemein räumlichen Spannungen, Temperaturen und Fluiddrücke entsprechend ihrer zeitlichen Veränderlichkeit zu berücksichtigen.
- Die grundsätzlichen Anforderungen zur Langzeitstabilität und Langzeitverträglichkeit mit dem umgebenden Gebirge sollten präzisiert werden. Es sollte erörtert und begründet dargelegt werden, unter welchen Voraussetzungen artifizielle und/oder lokationsfremde Materialien für die Errichtung geotechnischer Verschlussbauwerke als geeignet bzw. ungeeignet eingeschätzt werden.
- Für eine hinreichend abgesicherte Prognose und Analyse der langfristigen Sicherheit eines Endlagers sind die THMC-gekoppelten Materialeigenschaften und Prozesse zu berücksichtigen. Während für die Berücksichtigung von THM-Wechselwirkungen ein fortgeschrittener Stand der Technik erarbeitet wurde und wird, ist die Integration überlagerter chemischer Prozesse und hierzu gehört auch die Korrosion bisher nicht realisiert.
- Unter der Zielstellung einer Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle sind die Materialeigenschaften der Verschlussbaustoffe und die im Verbundsystem Baustoff-Gebirge ablaufenden Prozesse bei erhöhten Temperaturen zu untersuchen.

- Mit Bezug auf die unter Pos. (17) aufgeführte Anforderung an geotechnische Verschlussbauwerke sollten intensivierete Forschungsarbeiten zur Möglichkeit einer zerstörungsfreien Funktionalitätsprüfung von Verschlussbauwerken nach ihrer Errichtung veranlasst werden.
- Zur Berücksichtigung von Maßstabeffekten und der Verbundwirkung zwischen Baustoff und Gebirge erscheint es geboten, intensivierete Untersuchungen zur Zielstellung, Notwendigkeit, Ausgestaltung und Integration von Technikumsversuchen in das Nachweisinstrumentarium zu veranlassen.

Literatur

- /1/ AK Salzmechanik der DGGT (2021): Kompendium zum Stand von Wissenschaft und Technik bei der Planung und Ausführung geotechnischer Barrieren für Untertagedeponien im Salinargebirge, Papierflieger Verlag GmbH, Clausthal-Zellerfeld, 1. Auflage, ISBN 978-3-86948-812-7.
- /2/ Düsterloh, U. (2009): Geotechnische Sicherheitsnachweise für Hohlraumbauten im Salinargebirge unter besonderer Berücksichtigung laborativer Untersuchungen, Habilitationsschrift, Papierflieger Verlag GmbH, Clausthal-Zellerfeld, 2010, ISBN 978-3-86948-068-8.

1.9

D. Naumann¹, T. Popp²:

Wie messe ich was - mechanische Versuche zur Charakterisierung von Verschlussbaustoffen

¹ Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig, Deutschland

Email: dirk.naumann@ifg-leipzig.de

² Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig, Deutschland

Email: till.popp@ifg-leipzig.de

Zusammenfassung

Um eine geomechanische Nachweisführung mittels Modellrechnungen zu erbringen, ist es zwingend erforderlich, von Baustoffen, welche für Verschlussbauwerke in zukünftigen Endlagern eingesetzt werden sollen, Kennwerte zu ermitteln, welche deren Eigenschaften beschreiben und Eignungsabschätzung ermöglichen. Neben weiteren – wie hydraulischen oder chemischen – Untersuchungen, sind mechanische Untersuchungen in Form experimenteller Versuche unabdinglich, um derartige Parameter zu bestimmen. In zahlreichen Projekten zur Rezepturenentwicklung und Eignungsprüfung von Massenbaustoffen haben sich zahlreiche Untersuchungsmethoden etabliert, welche teils auch der Betonprüfung und Gesteinsprüfung bekannt sind, teils aber auch darüber hinaus gehen. Neben uniaxialen Druckfestigkeiten, Zugfestigkeiten, Scherfestigkeiten, triaxialen Festigkeiten und jeweils zugehörigem Verformungsverhalten, zählen Langzeitkriechversuche zu adäquaten Methoden und Versuchstypen, welche eingesetzt werden, da hier der Fokus auf den in-situ-relevanten zeitlichen Effekten liegt bzw. auf Langzeitverhalten extrapoliert werden kann. Des Weiteren sind Kontaktflächenuntersuchungen Baustoff-Gebirge von essenzieller Bedeutung.

Einleitung

Für den langzeitsicheren Verschluss zukünftiger Endlager für radioaktive Abfälle sind Verschlussbauwerke wie Schachtverschlüsse und Streckenverschlüsse als zentraler Teil des Sicherheitskonzepts zwingend erforderlich. Dabei fungieren derartige Bauwerke einerseits als Widerlager und andererseits als Dichtelement. Dazu muss im Vorfeld der Funktionsnachweis für ein derartiges geotechnisches Bauwerk erbracht werden, das heißt mittels Modellrechnungen eine geomechanische Nachweisführung zur Bauwerksintegrität und hydraulischem Widerstand geführt werden. Da zur Errichtung solcher

Bauwerke verschiedenartige Baustoffe zum Einsatz kommen können, ist es notwendig, diese potenziell einsetzbaren Baustoffe vorab hinsichtlich ihrer (gesteinsmechanischen) Eigenschaften zu untersuchen und zu parametrisieren, da dies essentielle Eingangsparameter für Modellrechnungen darstellen. Ein wesentlicher Bestandteil der Langzeitsicherheitsanalyse sind mechanische Berechnungen zum Spannungs-Verformungsverhalten der verschiedenen im Endlager zum Einsatz kommenden Baustoffe untereinander und dem umgebenden Gebirge.

Neben geochemischen, hydraulischen und thermischen Eigenschaften sind vor allem mechanische Eigenschaften von großer Bedeutung und bedürfen intensiver Untersuchung, um letztlich als geeigneter Baustoff mit eindeutigen Kennwerten zum Einsatz zu kommen. In der Vergangenheit gab es dazu einerseits intensive Entwicklungsarbeit hinsichtlich der Rezepturenentwicklung (aus chemisch-geochemischer Sicht) und andererseits umfangreiche notwendige mechanische Untersuchungen im Labormassstab, Technikumsversuch, in-situ-Großversuch bis hin zum Prototyp / Demonstrationsbauswerk.

Im nachfolgenden Beitrag (und zugehöriger Präsentation) liegt der Fokus dabei auf Laborversuchen welche einen essenziellen Beitrag zur Untersuchung, Parameterbestimmung und letztlich Eignungsabschätzung von Massenbaustoffen als Verschlussbaustoff leisten. Es wird hierbei nicht zwischen Zement-basierten (mit hydraulischem Binder) und MgO-basierten (Sorel-Binder) Massenbaustoffen bzw. Rezepturen unterschieden, da es bei den mechanischen Untersuchungen keine Unterscheidungen diesbezüglich gibt, was besonders bei vergleichenden Untersuchungen wichtig ist.

Generell orientieren sich die mechanischen Untersuchungen an Baustoffen für Verschlussmaßnahmen an Versuchen und Versuchstechniken aus Baustoffuntersuchungen (Betonprüfung) aber auch gesteinsmechanischen Laborversuchen und Untersuchungsmethoden, welche aus Gesteinsprüfungen (speziell Salinargesteine wie Steinsalz, Hartsalz, Kalisalze, Anhydrit etc.) bekannt sind.

Um derartige (gesteins-)mechanische Untersuchungen im Labormassstab durchzuführen ist es selbstverständlich erforderlich, Prüfkörper in notwendigen bzw. geeigneten Geometrien und Abmessungen herzustellen. Zumeist erfolgt dies an Proben, welche durch Eingießen von angemischtem Baustoff in KG-Rohre hergestellt wurden. Aus diesen lassen sich Prüfkörper für weitere Untersuchungen herstellen. Bei Proben aus Eignungstests im Großmassstab (Technikums-Versuch, Großversuch, Demonstrationsbauswerk) lassen sich natürlich Prüfkörper direkt aus dem Bauwerk gewinnen. Für den Fall

von frisch angemischtem Baustoff ist es erforderlich, Frischbetonprüfungen durchzuführen. Diese zielen auf die Anforderung der Reproduzierbarkeit der Qualität des Baustoffes ab. Das heißt, rheologische Messungen des angemischten Baustoffes zur Qualitätssicherung des Baustoffes an sich und die der Probenherstellung sind unabdinglich. Dies wird mittels Konsistenzmessungen wie beispielsweise Bestimmungen mittels Fließrinne, des Setzfließmaßes, dem Marshtrichter, dem Luftporengehalt und der Suspensionsdichte realisiert.

Des Weiteren werden – teils auch nach vorgegebenen Abbindezeiträumen – vor den eigentlichen mechanischen, experimentellen Untersuchungen weitere Voruntersuchungen durchgeführt. Dazu gehören neben der Vermessung und Wägung der Prüfkörper und der daraus resultierenden Rohdichtebestimmung auch Ultraschalluntersuchungen. Diese geben wichtige Hinweise auf die Intaktheit / Integrität der Probe (Stichwort Rissbildung) sowie hinsichtlich auf die Homogenität der Probe bzw. einer Probenserie (-charge/-rezeptur).

In Abb. 1 ist dazu für einen untersuchten Baustoff ein Beispiel für die Entwicklung der Ultraschallgeschwindigkeiten (für v_P) in Abhängigkeit vom Abbindezeitalter dargestellt. Dazu wurden einerseits Proben untersucht, die ausschließlich für derartige Untersuchungen hergestellt wurden und andererseits mit Proben verglichen, für die diese Untersuchungsmethodik eine Voruntersuchung darstellt und im Nachgang mechanisch geprüft wurden (z.B. UC-Versuch). Eine gute Korrelation beider unterstreicht die gleichbleibende Qualität des Baustoffes.

Wie vorab aufgeführt, sind rein mechanische Untersuchungen erforderlich, um Kennwerte der Baustoffe zu bestimmen bzw. abzuleiten, die für die Nachweisführung erforderlichen Modellrechnungen notwendig sind. Der oder die Baustoffe müssen dabei diversen Anforderungen gerecht werden. So sollen sie Lasten- z.B. resultierend aus dem Gebirgsdruck – aufnehmen bzw. ableiten. Des Weiteren müssen sie die Eigenschaft aufweisen, Verformungen limitieren zu können. Zudem müssen sie einen Beitrag leisten, die Standsicherheit des Gebäudes zu erhalten. Dies bedeutet, sie sollen in ihren Eigenschaften Stütz- und Standsicherheitsfunktionen erfüllen. Dies ist neben der Barrierefunktion von Baustoffen (z.B. Lösungszutritte verhindern / begrenzen; Zustand der geologischen Barriere aufrechterhalten) Voraussetzung für deren Einsatz.

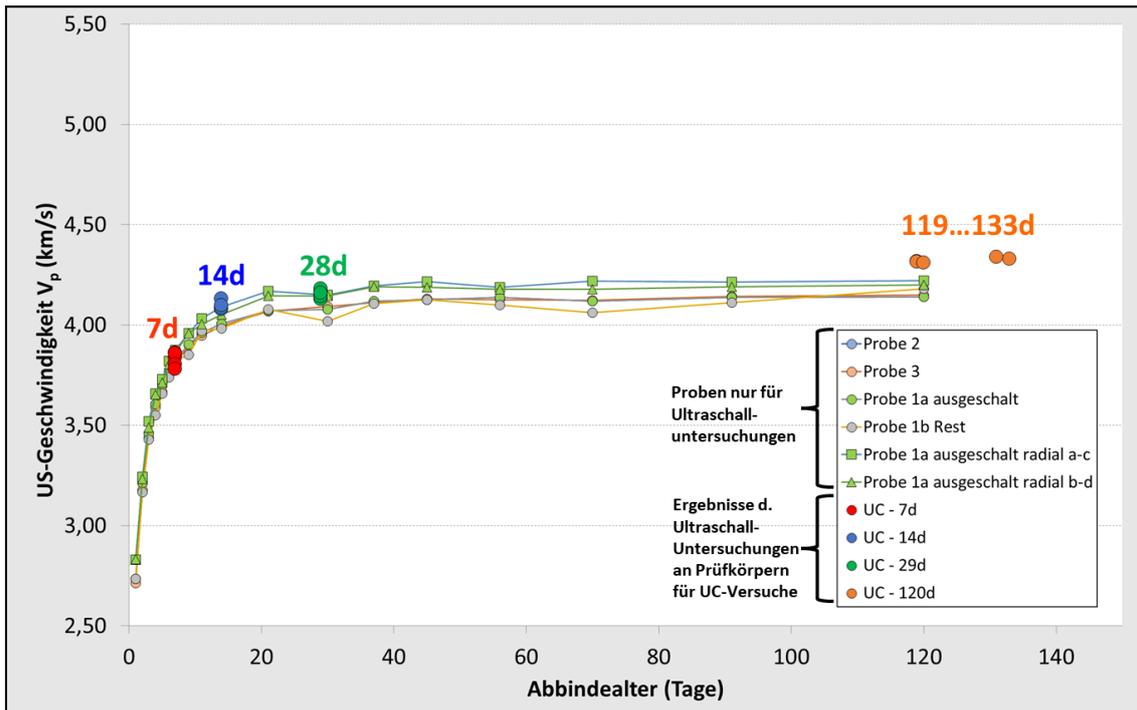


Abb. 1 Entwicklung der Ultraschallgeschwindigkeiten (v_p in km/s) in Abhängigkeit vom Abbindealter der Baustoffproben

Mechanische Untersuchungen ermöglichen dabei die experimentelle Parameterbestimmung von geomechanischen (und physikalischen) Eigenschaften des Baustoffes. Dies können sein die Bestimmung von:

- Einaxialer Druckfestigkeit (Zylinder und/oder Würfel)
- Statischem Elastizitätsmodul
- Statischer Querkontraktionszahl
- Einaxialer Zugfestigkeit (direkt oder als Spaltzugfestigkeit)
- Scherfestigkeit und MOHR-COULOMB-Parametern
- Triaxialer Druckfestigkeit und Verformungsverhalten
- Kriechverhalten: Druckkriechen (isotrop und/oder deviatorisch)
- Kriechverhalten: Zugkriechen
- ...

Im Nachfolgenden werden einige Beispiele derartiger Versuche und Parameterbestimmungen aufgeführt.

Beispiel - Uniaxialer Druckversuch

Der uniaxiale Druckversuch ist ein einfacher Versuch zur Ermittlung von Festigkeits- und Verformungseigenschaften eines Materials. Die Durchführung dazu erfolgt häufig gemäß Empfehlung Nr.1 des Arbeitskreises „Versuchstechnik Fels“ der Deutschen Gesellschaft für Geotechnik e.V. „Einaxiale Druckversuche an zylindrischen Gesteinsprüfkörpern“. Ebenso können andere Normen (DIN), Empfehlungen (ISRM) und Standards (ASTM) zum Tragen kommen. Beim einachsigen Druckversuch erfolgt ausschließlich eine vertikale Krafteinleitung in die zumeist zylindrische Probe (bzw. Würfelprobe). Eine Einspannung (z.B. mit wirkendem Manteldruck erfolgt nicht). Dies entspricht beispielsweise Spannungsbedingungen an der luftseitigen Bauwerkskontur. Entsprechend der Vorgaben wird häufig eine verformungsgeregelte Versuchsfahrweise gewählt. Dabei können Lastschleifen (Entlastungs-/Wiederbelastungsschleifen) im Vorbruchbereich zwischengeschaltet werden, um elastische Parameter (E-Modul) zu ermitteln. Im eigentlichen Versuch erfolgt dann eine Lasterhöhung bis zum Bruch bzw. in den Nachbruchbereich. Dabei werden kontinuierlich Kraft und Deformation (Stauchung der Probe) erfasst. Letztlich lassen sich somit die

- max. uniaxiale Druckfestigkeit,
- Restfestigkeit,
- Bruchdehnung,
- Max. Längsdehnung,
- E-Modul

und bei Einsatz von z.B. aufgeklebter DMS-Applikationen oder Umfangsmessketten auch

- Querdehnung

ermitteln.

Zumeist ergeben sich in diesen Versuchen Bruchbilder, bei den die Proben Längsrisse (parallel der Krafteinleitung) bzw. teils Bruchkegel aufweisen. In Abb. 2 ist exemplarisch ein uniaxialer Druckversuch in Verformungsregelung als Spannungs-Verformungsdiagramm dargestellt. Die Baustoffprobe versagte dabei bei einer Bruchspannung von ca. 50 MPa (und 0,8% axialer Stauchung). Der E-Modul wurde mittels Lastschleife (bei ca. 50% der max. Druckfestigkeit mit 22,3 GPa bestimmt.

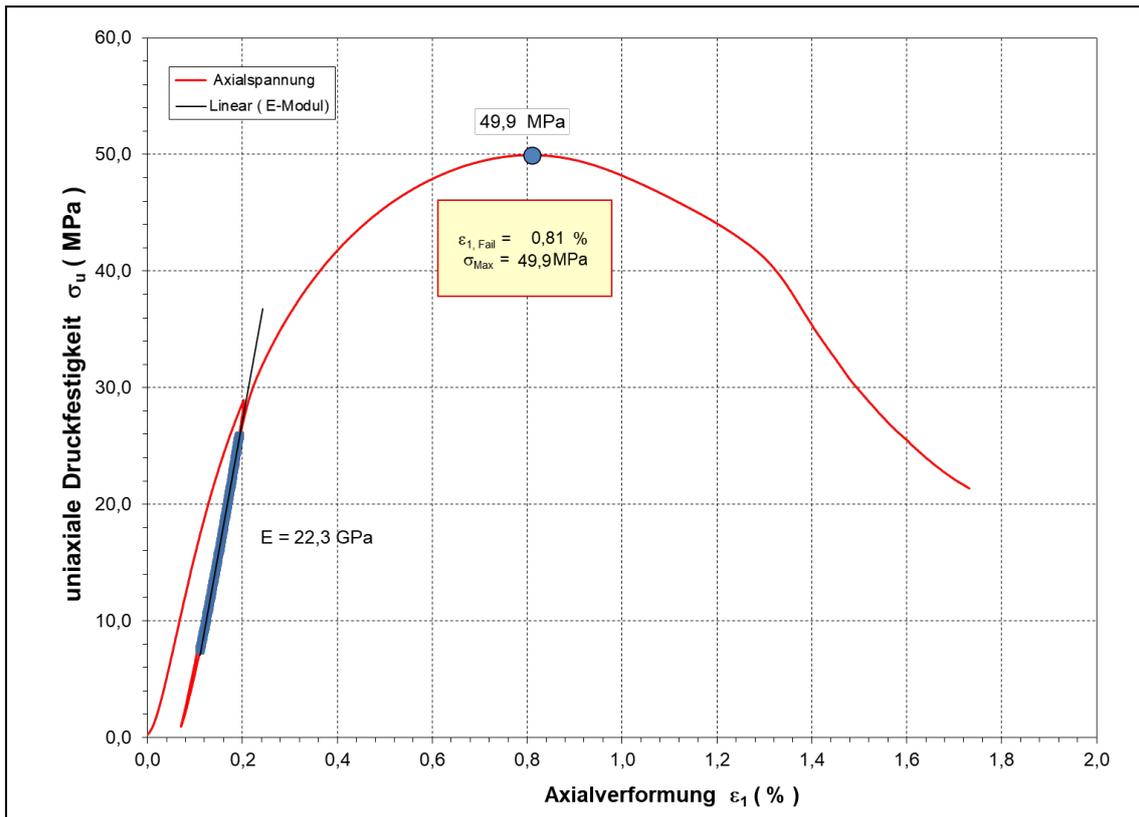


Abb. 2 Beispiel eines verformungsgeregelten uniaxialen Druckversuches an einer zylindrischen Baustoffprobe

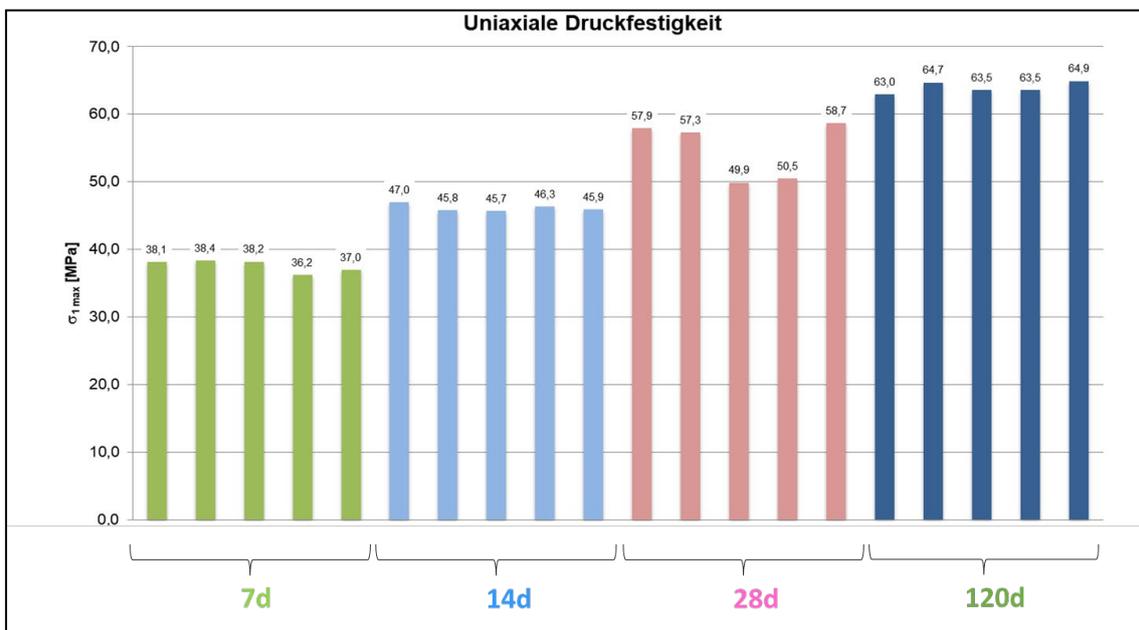


Abb. 3 Zeitabhängige Entwicklung der uniaxialen Druckfestigkeit eines Baustoffes für eine Streckenverschlussmassnahme

Abb. 3 zeigt ein Beispiel einer Versuchsserie von UC-Versuchen an Baustoffproben, bei denen eindeutig der Einfluss des Abbindeverhaltens (also Abbindedauer/Baustoffalter) auf die maximale uniaxiale Druckfestigkeit nachgewiesen werden konnte.

Beispiel - Triaxialer Druckversuch

Triaxiale Druckversuche zur Ermittlung des Festigkeits- und Verformungsverhaltens von Gesteinen werden im Labormassstab häufig gemäß Empfehlung Nr.2 des Arbeitskreises „Versuchstechnik Fels“ der Deutschen Gesellschaft für Geotechnik e. V. „Dreiaxiale Druckversuche an Gesteinsproben“ durchgeführt und lassen sich auch auf Baustoffe und deren Prüfung übertragen. Hierbei werden häufig ganze Versuchsserien durchgeführt, bei denen der wirkende Manteldruck ($\sigma_2 = \sigma_3$) entsprechend dem wirkenden Gebirgsdruck variiert wird, je Einzelversuch allerdings während der Versuchsdurchführung konstant gehalten wird. Die Vertikalspannung (und resultierende Deviatorspannung) wird im Versuch – analog dem UC-Versuch – bis zum Bruch erhöht bzw. mit weiterer Verformung bis in den Nachbruchbereich gefahren. Auch hier sind Variationen (Verformungsregelung / Kraftregelung) sowie Versuche mit Lastschleifen oder Versuche in Mehrstufentechnik (besonders bei geringer Probenanzahl) möglich. Während der Versuchsdurchführung werden dabei Kräfte und Deformationen kontinuierlich erfasst und Kennwerte wie:

- max. Druckfestigkeit,
- Dilatanzfestigkeit,
- Restfestigkeit,
- Längsdehnung,
- volumetrische Verformungen

ermittelt. Selbstverständlich können die Versuche unter in-situ-Temperaturbedingungen realisiert werden.

In Abb. 4 ist der typische Versuchsverlauf eines Triaxialversuches an einer Baustoffprobe bei 1 MPa wirkender Einspannung (Manteldruck) dargestellt. Bei etwa 1,1% axialer Verformung kommt es zum Bruch (bei einer maximalen Bruchfestigkeit von ca. 64 MPa). Ab ca. 0,8% axialer Verformung kommt es mit zunehmender Schädigung zu Volumenzunahme. Abb. 5 zeigt die fotografische Dokumentation einer Triaxialprobe vor und nach dem Versuch. Wie aus den Versuchen an Salinargesteinen bekannt, kommt

es auch bei den Baustoffen mit zunehmender Einspannung zum Übergang vom spröden zum eher duktilen Verhalten.

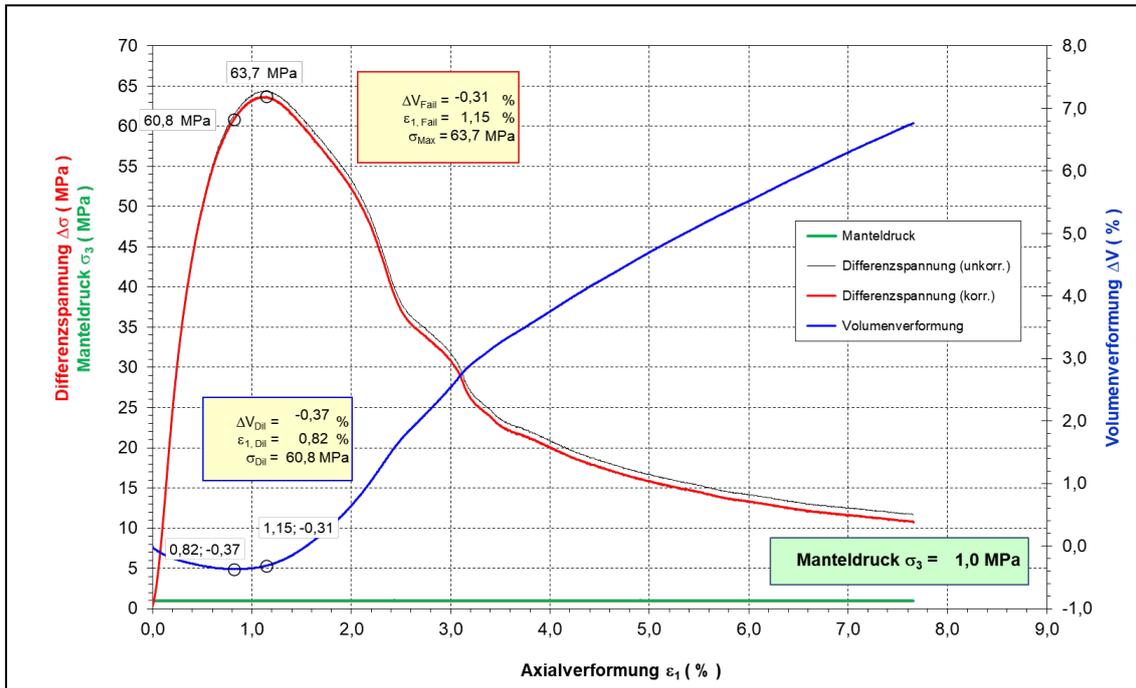


Abb. 4 Beispiel eines verformungsgeregelten triaxialen Druckversuches an einer zylindrischen Baustoffprobe

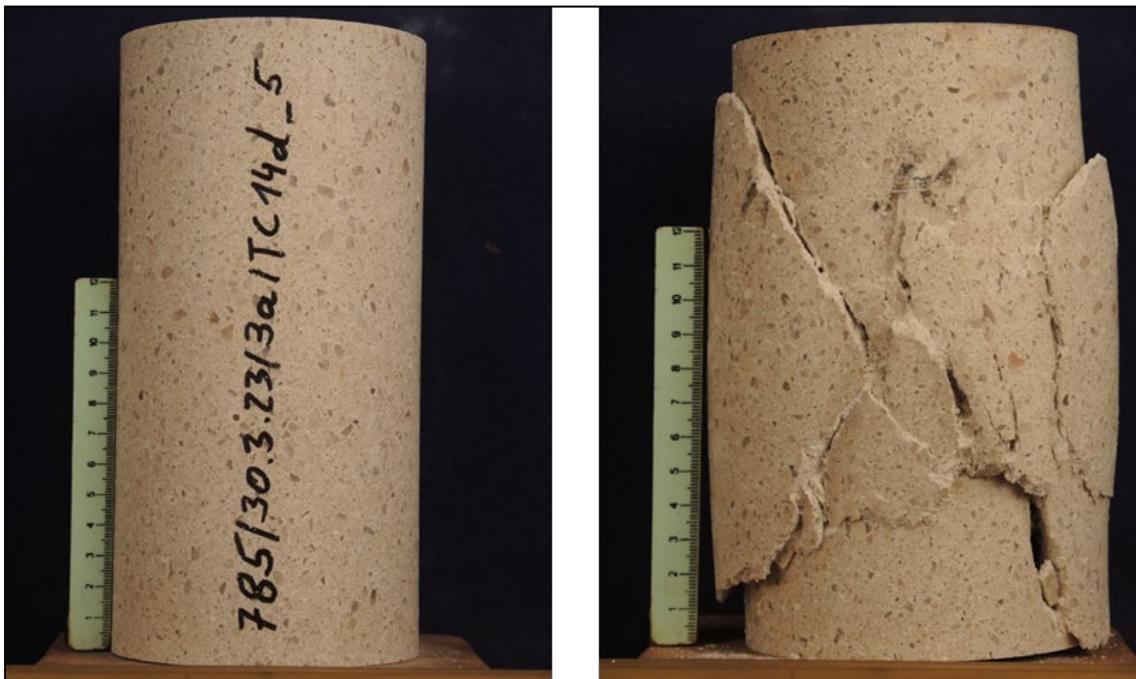


Abb. 5 Fotodokumentation eines verformungsgeregelten triaxialen Druckversuches an einer zylindrischen Baustoffprobe; Links: vor und Rechts: nach dem Versuch

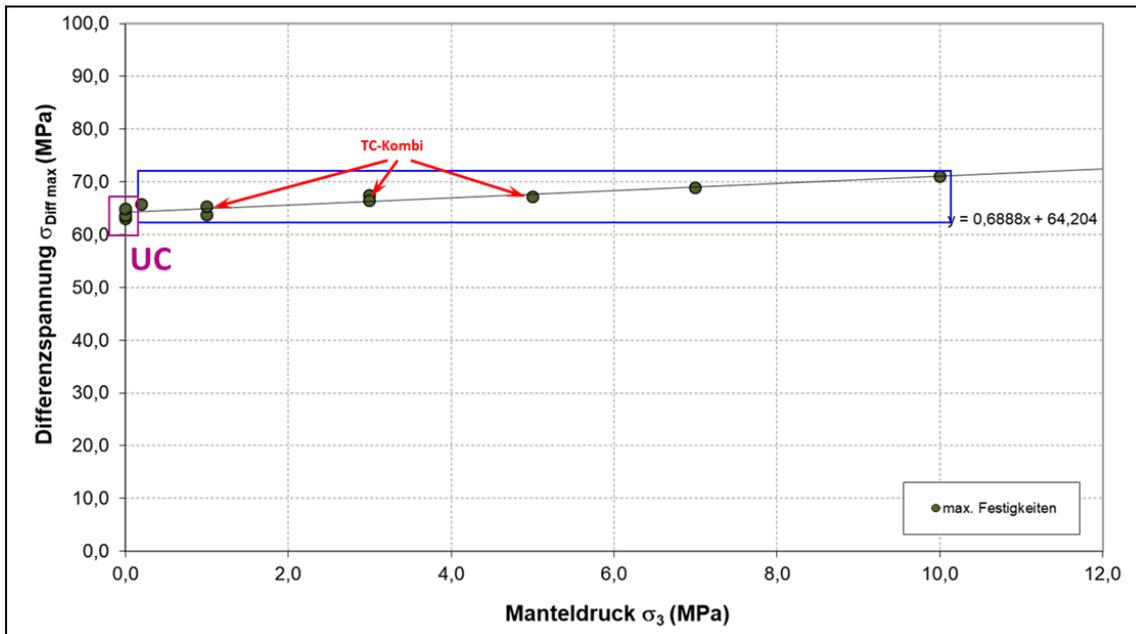


Abb. 6 Beispiel einer Serie von triaxialen Druckversuchen (max. Festigkeiten) einer Baustoffcharge; mit UC sind zudem die Ergebnisse der uniaxialen Druckversuche markiert

Weiterhin ist in Abb. 6 das Festigkeitsverhalten von Baustoffproben einer Charge/Rezeptur in Abhängigkeit von der Einspannung (wirkendem Manteldruck) abgebildet. Die aus den TC-Versuchen abgeleitete UC-Festigkeit (64,2 MPa) trifft dabei sehr gut die direkt mittels UC-Versuchen bestimmten einachsigen Druckfestigkeiten. Weiterhin wird in diesem Diagramm gezeigt, dass triaxiale Festigkeiten aus sogenannten Kombinationsversuchen sehr gut mit denen aus einstufigen Versuchen korrelieren. Bei den Kombi-Versuchen koppelt man verschiedene Versuchstypen. So wurden in diversen Untersuchungen an einem einzigen Prüfkörper beispielsweise isotrope Lastschleifen gefahren, danach Relaxationsversuche (über längere Zeiträume) und im Anschluss daran ein klassischer Triaxialversuch (bis in den Nachbruchbereich). Trotz „Vorgeschichte“ des Prüfkörpers sind die Ergebnisse belastbar und repräsentativ. Derartige Kombinationen aus Versuchen machen vor allem Sinn, wenn nur eine begrenzte Anzahl an Prüfkörpern zur Verfügung steht.

Eine Besonderheit des hier exemplarischen abgebildeten Festigkeitsverhaltens ist, dass der untersuchte Baustoff kaum eine Manteldruckabhängigkeit – wie von anderen Baustoffen oder Gesteinen bekannt – aufweist. Gründe könnten u.a. in wirkenden Porendrücken liegen.

Eine Abhängigkeit des Festigkeits-Verformungs-Verhaltens vom Abbindealter kann allerdings in zahlreichen Versuchen mit definiertem Baustoffalter nachgewiesen werden. Dies ist ebenso von Bedeutung, da dem Baustoff möglichst eine schnell wirksame und langzeitwirksame Funktion zukommt.

Beispiel - Langzeit-Kriechversuch

Während die bisher vorgestellten Beispiele an Versuchstypen und -methoden zur Kennwertbestimmung von Kurzzeitfestigkeiten und -verformungsverhalten geeignet sind, gibt es auch Versuchstechniken, die das – für die Einlagerung ebenso enorm wichtigen – Langzeitverhalten – besonders des zeitabhängigen Deformationsverhaltens – untersuchen und beschreiben. Dazu gehören neben Relaxationsversuchen (in welchen es zum internen Spannungsabbau durch Kompaktion des Porenraums bei „angehaltener“ Verformung kommt und welche eine Extrapolation auf Langzeiteigenschaften wie Tragwiderstände unter in-situ-Verformungsraten zulassen) auch Langzeit-Kriechversuche bei triaxialer Einspannung. Dabei können isotrope Spannungen ($\sigma_{ax} = \sigma_{conf}$) ebenso realisiert werden wie deviatorische Spannungsbedingungen mit $\sigma_{ax} = \sigma_{conf}$. Die Spannungen werden dabei – bei in-situ-relevanten Temperaturbedingungen während des Versuches – konstant gehalten (zumindest je Laststufe). Mit fortschreitender Versuchszeit lassen sich dabei nahezu stationäre Raten erreichen.

In Abb. 7 ist der Verlauf eines Kriechversuches unter isotropen Einspannungsbedingungen und einer Versuchsdauer von 350 Tagen abgebildet, wobei quasi-stationäre Zustände erreicht wurden und eine Kriechrate von $3,5 \cdot 10^{-12} \text{ s}^{-1}$ bestimmt wurde.

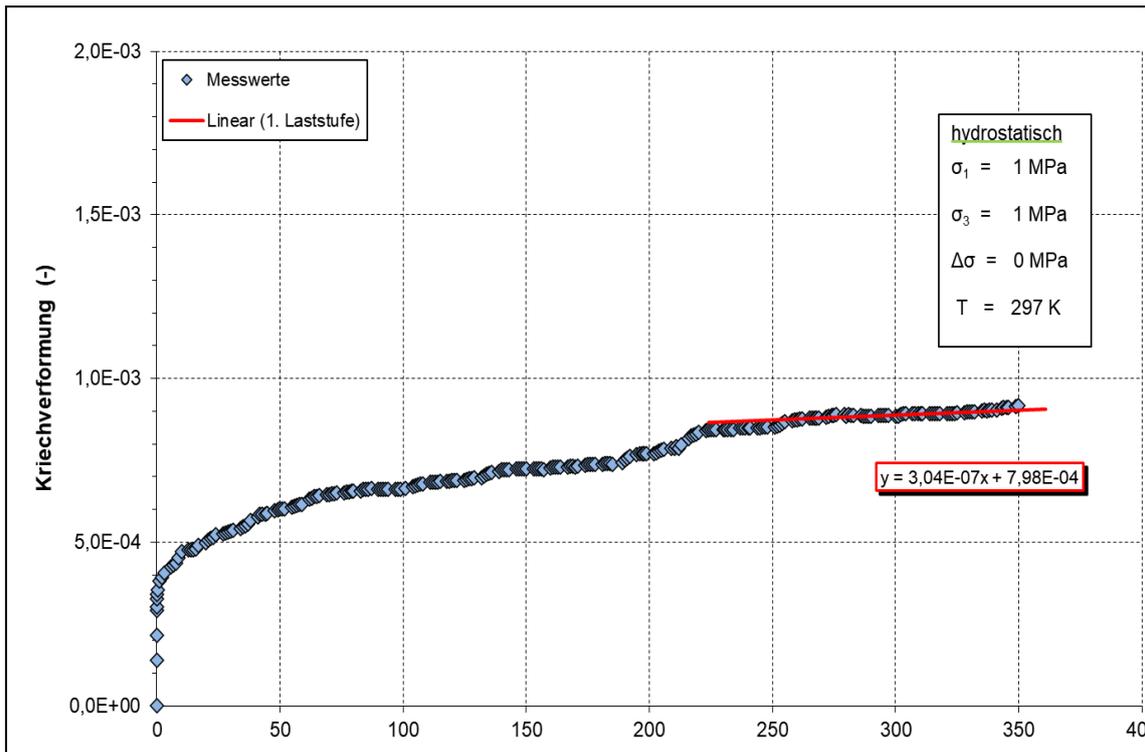


Abb. 7 Beispiel eines Langzeitkriechversuches (TCC) bei isotropen Bedingungen ($\sigma_{ax} = \sigma_{conf}$), also ohne wirkenden Deviator. Die Laufzeit betrug ca. 350 Tage und die Kriechrate $3,5 \cdot 10^{-12} \text{ s}^{-1}$.

Versuche an Kontakten / Kontaktflächen

Während die bisher aufgeführten Versuche und mechanischen Untersuchungen darauf abzielten, Eigenschaften und Materialkennwerte vom reinen, homogenen Baustoff zu ermitteln, ist es für die aufgeführten Fragestellungen und Nachweisführungen zwingend erforderlich, auch die Kontaktflächeneigenschaften bzw. geomechanische Eigenschaften am Kontakt zwischen Baustoff und Gebirge zu bestimmen. Hier muss die Widerlagerfunktion gegeben sein und ein dauerhafter stabiler Baustoffkörper vorhanden sein und somit muss der Nachweis der Funktion ohne Festigkeitsversagen auch im Kontaktbereich erbracht werden.

Für derartige Untersuchungen eignen sich besonders Haftzug- und Scherfestigkeitsversuche an Prüfkörpern, die einen Kontakt/Übergang vom Gebirge (Salinar) zum Baustoff aufweisen. Für derartige Untersuchungen können Baustoffe auf Gesteinsproben (mit insitu-relevanter Oberfläche) aufgegossen werden (und nach definiertem Abbindealter geprüft werden) oder direkt aus dem Verbund Baustoff-Gebirge (z.B. am Demonstrationsbauwerk) ausgebohrt werden. Es eignen sich sowohl Proben mit halbseitigem Baustoff-

bzw. Salinaranteil (s. Typ „liegender Kern“ in Abb. 8 links; Kontaktfläche parallel zur Bohrachse) als auch mit etwa gleichen Anteilen Baustoff bzw. Salinar allerdings mit Kontaktfläche senkrecht zur Bohrachse (siehe Typ „stehender Kern“ in Abb. 8 rechts). Während zweiterer Typ sich sowohl für Haftzug- als auch für Scherversuche gleichermaßen eignet, ist ersterer aufgrund seiner Geometrie eher für Scherversuche geeignet.



Abb. 8 Links: Probenotyp „Liegender Kern“ für Scherversuche; Rechts: Prüfkörper-typ „Stehender Kern“ für (hier abgebildet) Haftzugversuche aber auch Scherversuche

Um eine gleichmäßige Krafteinleitung (Zugwirkung) in durchzuführenden Haftzugversuchen zu ermöglichen, erwies es sich als zweckmäßig, Zugplatten auf die planparallelen Endflächen von zylindrischen Prüfkörpern aufzukleben (beispielsweise mittels hochfesten Zweikomponentenklebern). Die Zugversuche werden ohne wirkende Einspannung (Manteldruck) realisiert. Dabei wird bei konstanter Verformung (oder Krafterhöhung) die Zugspannung so lange erhöht, bis es zum Versagen – sprich Zugbruch – kommt. Häufig versagen die Proben mit Kontakt zwischen Baustoff und Gebirge auch tatsächlich exakt an den Kontaktflächen. Zumeist tritt dies recht spontan / abrupt auf und zeigt sich als deutlicher Drop im Spannungs-Verformungs-Diagramm. Nicht selten sind dabei aber auch Anhaftungen von (beispielsweise) Salinarresten (-körnern), die auf ein sehr gutes Anhaftvermögen des eingesetzten Baustoffes hinweisen. Als ermittelbare Kennwerte stehen bei diesem Versuchstyp besonders die max. Zugfestigkeit bzw. die Längsdehnung im Fokus.

Wie erwähnt eignen sich Prüfkörper mit derartigem Probenaufbau, -geometrien und Kontaktflächen auch sehr gut zur Ermittlung von Scherparametern und der Ableitung von MOHR-COULOMB-Parametern. Dazu ist es erforderlich, den Prüfkörper beispielsweise in einem Großschergerät zu fixieren und die Kontaktfläche einer exakt senkrecht dazu wirkenden – konstant gehaltenen - Normalspannung auszusetzen. Gleichzeitig wird bei

konstanter Verschiebungsrate die Schubspannung erhöht und der Prüfkörper entlang des Kontaktes (horizontal) durchschert. Üblicherweise kommt es dabei zur Erhöhung der Scherspannung bis zum Versagen (Scherbruch) und vollständiger Durchscherung. Anschließend fällt die Scherspannung auf ein Restfestigkeitsniveau ab. Erfasst werden in diesem Versuch sowohl die wirkenden Vertikal- und Horizontalkräfte (also Normal- und Schubspannung) als auch vertikale Verformungen (Kompaktion und Aufgleiten) und horizontale Verschiebungen (Scherweg). Aus Versuchsserien bei variierten Normalspannungsbedingungen lassen sich Festigkeitsgrenzen aber auch Kennwerte wie Kohäsion und Reibungswinkel ableiten.

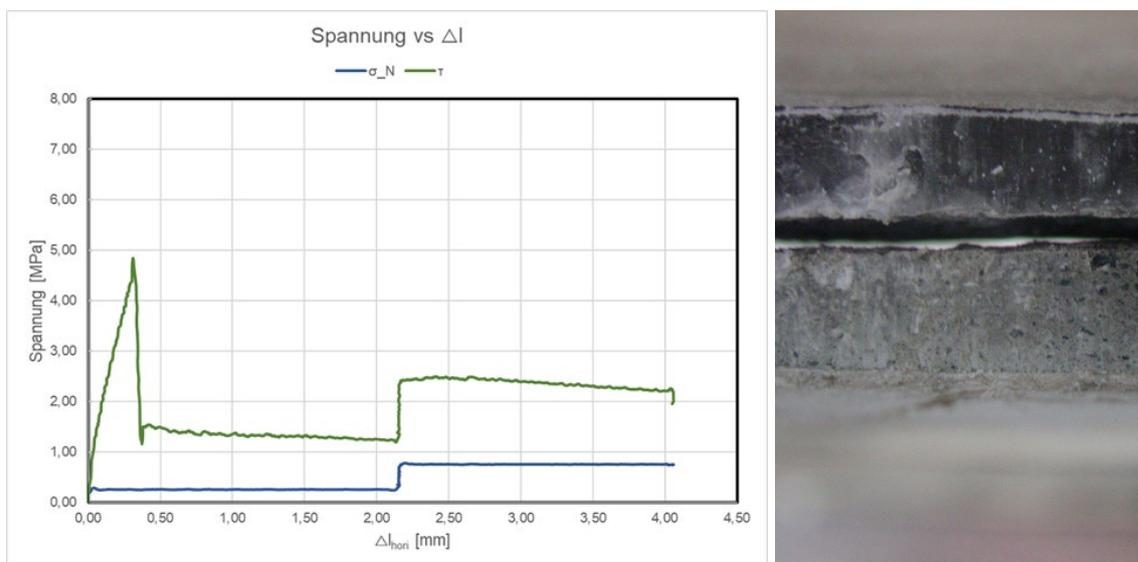


Abb. 9 Links: Typischer Versuchsverlauf eines Scherversuches an einer Probe mit Kontaktfläche zwischen Baustoff und Salinar; Rechts: Detailfoto des Scherversagens einer Kontaktfläche von Steinsalz (oben) und Baustoff (unten).

Es sei zudem darauf hingewiesen, dass derartige Haftzug- und Scherversuche natürlich nicht nur an den Kontaktflächen zwischen Baustoff und Gebirge (zumeist Salinar) durchgeführt werden, sondern ebenfalls standardmäßig auch am reinen Baustoff, um dessen Zug- und Scherkennwerte zu parametrisieren. Die Kontaktflächenuntersuchungen stellen allerdings eine Besonderheit dar.

1.10

E Jahns¹ und T. Popp²:

Hydraulische Versuchstechniken zur Charakterisierung von Verschlussbaustoffen

¹ *GL Test Systems GmbH, Heiligenstadt, Deutschland*
Email: jahns@gl-testsystems.com

² *Institut für Gebirgsmechanik, Leipzig, Deutschland*
Email: till.popp@ifg-leipzig.de

Zusammenfassung

Der vorliegende Tagungsbetrag beschreibt Verfahren zur Bestimmung von hydraulischen Parametern an sehr dichten Gesteinen oder Baustoffen, wie sie für Abdichtbauwerke in Betracht kommen. Es wird begründet, warum stationäre Durchströmungsversuche den instationären vorzuziehen sind und dass für die Permeabilitätsbestimmung der Kontaktzone Baustoff/Gebirge eine radiale Geometrie des Versuchsaufbaus von großem Vorteil sein kann.

Für die Probenvorbereitung (Trocknung/Sättigung) wird im Allgemeinen ein deutlich höherer Aufwand, auch zeitlich, betrieben werden müssen, als bei üblichen Untersuchungen an Gesteinen. Die Durchströmungsversuche verlangen eine hohe Messgenauigkeit der Messtechnik und, insbesondere bei der Lösungspermeabilität und der Bestimmung des kapillaren Sperrdrucks, einen beträchtlichen Zeitaufwand.

Einleitung

Ein wesentlicher Bestandteil einer Langzeitsicherheitsanalyse sind hydraulische Berechnungen zum Stofftransport. In diesen Berechnungen wird sowohl der Gas- als auch Lösungstransport sowie das Speichervermögen von Hohlräumen, Gebirge und Baustoffen betrachtet. Für diese Berechnungen müssen die hydraulischen Eigenschaften der beteiligten Materialien und deren Verbände parametrisiert werden.

Dieser Tagungsbeitrag gibt einen Überblick über die Verfahren zur Bestimmung dieser Parameter an Probekörpern im Labormaßstab. Benannt werden dabei auch geeignete Verfahren zur Prüfkörperherstellung und ihrer Konditionierung. Der Beitrag erhebt nicht den Anspruch auf Vollständigkeit.

Methodik – stationäre Messungen

Für die Bestimmung der Permeabilität von Gesteinsproben im Labor können sowohl instationäre als auch stationäre Messmethoden eingesetzt werden. In diesem Beitrag wird das stationäre Messverfahren zur Bestimmung der Gas- und Laugendurchlässigkeit beschrieben, weil es nach unserer Einschätzung gegenüber den instationären Messungen vor dem Hintergrund der vorliegenden Aufgabenstellung Vorteile besitzt.

In einer Bewertung der Ergebnisse von Gaspermeabilitätsmessungen kommen PUSCH et al. (1986) hinsichtlich der Vergleichbarkeit beider Verfahren u. a. zu folgenden Schlussfolgerungen:

- Stationäre und instationäre Permeabilitätsmessverfahren unterscheiden sich vom Messaufwand her kaum. Die instationäre Methode erfordert keine Strömungsratenmessung, dafür aber die Bestimmung der Porosität des Mediums. Gleichzeitig muss die Kompressibilität des Messfluids und der Messanordnung bekannt sein.
- Bei einfachen Porenraumsystemen ergeben beide Methoden identische Messwerte.
- Im Gegensatz zum instationären Messverfahren ist unter stationären Bedingungen keine Bestimmung der effektiven Porosität notwendig.

Bei stationärem Gasfluss ist die Druckverteilung entlang des Kerns zeitlich unveränderlich. Es stellt sich ein Gleichgewicht zwischen dem Druck auf den Fließwegen des Gases und der Menge des in den Sackporen gespeicherten Mediums ein. Als Folge davon tritt während des Flusses kein strömendes Gas in die Sackporen oder gespeichertes Gas in die Strömungswege über.

Bei der instationären Messung verändert sich der Druck zeitabhängig nicht nur am Kernende, sondern auch entlang der Kernstrecke. Damit ist auch die in den Sackporen bzw. Mikroporen gespeicherte Gasmenge nicht konstant, d.h. der Druckausgleich verlangsamt sich in der Regel und ist somit unstetig. Der Anstieg einer Druck-/Zeit-Darstellung wird geringer, daher muss auch die berechnete Permeabilität kleiner werden. In der Konsequenz werden mit instationären Messverfahren oft zu niedrige Werte bestimmt.

Der Einfluss des Gasspeichereffekts (bzw. der effektiv durchströmten Porosität) auf die instationäre Messmethode kann bei numerischen Auswerteverfahren zwar prinzipiell berücksichtigt werden, ist aber schwer genau zu definieren.

Gleichzeitig entspricht ein Druckstoß- oder Pulstest, wie er beim instationären Messverfahren durchgeführt wird, nicht den realen Druckbedingungen bei einem Lösungsangriff auf eine technische Barriere. Im Kontakt mit der Lösung wird in Abhängigkeit vom Fluidruck die Lösung in das Bauwerk eintreten und es allmählich durchströmen. Dabei stellen sich stationäre Strömungsbedingungen ein. Insofern erscheint ein stationäres Messverfahren geeigneter zur Bestimmung hydraulischer Kontaktflächeneigenschaften.

Materialien

Betrachtet werden Messverfahren zur hydraulischen Charakterisierung von sehr dichten Materialien (Tonstein, Salzbeton, MgO-Baustoffe...), also Materialien mit einer sehr geringen Durchlässigkeit gegenüber Flüssigkeiten und Gasen, die zur Verwendung für ein Abdichtbauwerk in Frage kommen. Im Sinne der voraussichtlich in 2024 erscheinenden Empfehlung E26 der DGGT über die Durchlässigkeit von geringpermeablen Gesteinen und in Anlehnung an die DIN EN ISO 22282-6 bedeutet dies eine Permeabilität von $k < 10^{-15} \text{ m}^2$. Im tatsächlichen Einsatz für ein Abdichtbauwerk werden aber eher Materialien mit Durchlässigkeiten von $k \leq 10^{-19} \text{ m}^2$ in Frage kommen. Dieser Beitrag spricht daher mit „geringdurchlässig“ ebensolche Baustoffe an.

Probenvorbereitung

Prüfkörperherstellung von Prüfkörpern aus Proben oder Bohrkernen

Die mechanische Herstellung von zylindrischen Probekörpern für die hydraulischen Untersuchungen im Labor erfolgen bei salzhaltigen Baustoffen ohne den Zusatz von Bohrspülungen mit Hilfe von Trennmaschine und Drehbank. Ausgangsmaterial können dafür im Gebirge entnommene Bohrkern oder künstlich hergestellte Proben sein.

Für die mechanische Bearbeitung von Tonsteinen haben sich Bohrspülungen aus mineralischen, leicht flüchtigen Ölen bewährt. In jedem Fall müssen die Mantelflächen aller Probekörper glatt und frei von Unregelmäßigkeiten und die Endflächen der Probekörper eben und rechtwinklig zur Prüfkörperachse ausgerichtet sein (zum Beispiel gemäß ASTM D4543).

Probencharakterisierung

Zur Dokumentation und Charakterisierung der Probekörper sind mindestens folgende Schritte empfehlenswert:

- Beschriftung mit einer eindeutigen Kennzeichnung
- Fotografische Aufnahme der Prüfkörper von allen Seiten (z. B. 6 Aufnahmen: beide Stirnflächen, Mantelfläche über vier Aufnahmen jeweils um 90° im Uhrzeigersinn gedreht)
- Bestimmung der geometrischen Abmessungen in Anlehnung an DIN EN 12390
- Wägung der Probe, Berechnung der Rohdichte gemäß DIN EN 1936

Zusätzlich können die Prüfkörper zum Nachweis ihrer Integrität mit P- und S-Wellen in verschiedenen Raumrichtungen (quer und längs zur Prüfkörperachse) durchschallt werden. Über Höhe und Variation der daraus abgeleiteten P- und S-Wellengeschwindigkeiten lassen sich Rückschlüsse auf eine mögliche Vorschädigung sowie ggfls. den Abbindezustand ziehen.

Prüfkörperkonditionierung - Untersuchungen an trockenen Proben

Für die Ermittlung von Materialparametern zur Beschreibung des strömungstechnisch-mechanischen Verhaltens von Baustoffen/Bauwerken muss zum einen

- das im Gefüge ggf. befindliche mobile (freie) Wasser zur Beurteilung der Sättigung des Porenraumes bekannt sein
→ ggfs. Trocknung von Materialproben, z. B. gemäß DIN EN ISO 17892-1 bei 105 °C bis zur Massekonstanz

und zum anderen

- ist die Herstellung eines Probenzustands notwendig, welcher die Ermittlung der Dichten (Reindichte, Trockendichte) und der fluidzugänglichen Porosität erlaubt
→ die bereitgestellten Proben müssen (z. B. bei MgO-Baustoffen) hinreichend abgebunden sein.

Für die Trocknung derartiger Probekörper gibt es bisher keine Norm oder Empfehlung. Gängige Verfahren sind die Trocknung im Vakuumofen bei etwa 40°C oder die Trocknung bei ähnlichen Temperaturen, aber bei einer vorgegebenen Luftfeuchtigkeit von z. B. 35% relativer Feuchte.

Porositätsmessungen an originär trockenen oder getrockneten Proben

Nach Trocknung kann die Gas-Porosität mit einem üblichen Gaspyknometer bestimmt werden. Hierbei wird zu einem mit einem Gasdruck befüllten Probenhalter ein Referenzvolumen bekannter Größe hinzugeschaltet. Aus dem Druckabfall kann mit Hilfe des idealen Gasgesetzes der Festanteil im Probenhalter und mit den geometrischen Abmessungen und dem Gewicht des Probekörpers die Korndichte sowie die offene Porosität berechnet werden. Zu beachten ist, dass aufgrund der geringen Durchlässigkeit des Probenmaterials diese Messung einen langen Zeitraum in Anspruch nehmen kann. Die Dichtigkeit und die Messgenauigkeit des Messgeräts müssen dementsprechend von hoher Qualität sein.

Prüfkörperkonditionierung und Porosität - gesättigte Proben

Für die hydraulischen Untersuchungen mit salinaren Lösungen müssen die Prüfkörper mit der Lösung gesättigt sein. Dies erfolgt im Allgemeinen durch Evakuierung der Probekörper auf einen sehr niedrigen Druck im Bereich von wenigen mbar und anschließender Befüllung des evakuierten Behälters mit der entsprechenden Lösung.

Zu beachten ist hierbei,

- dass bei Vakuumversuchen an hydratisierten Salzmineralphasen (z.B. Carnallit) das Absenken des Wasserdampfpartialdrucks zu einer kinetisch kontrollierten Zersetzung der Hydrate führen kann.
- dass sowohl Trocknung als auch Aufsättigung einer tonhaltigen Probe zu Schrumpfung bzw. Quellung quellfähiger Tonminerale und damit zu einer Vorschädigung der Probe führen können. Empfehlenswert kann hier die (aufwändige) Aufsättigung unter in-situ Bedingungen, also unter äußerer Einspannung sein.

Bei diesem Verfahren der Sättigung erfolgt die Ermittlung der maximalen Lösungsaufnahme sowie der Lösungsporosität über die Massenzunahme bzw. die bekannten Lösungsdichten. Wegen der geringen Durchlässigkeit der Proben sollten – möglichst ohne die Probe aus der Lösung zu entnehmen - wiederholt Wägungen durchgeführt werden, um das Erreichen der Massenkonstanz dokumentieren zu können.

Permeabilität mit stationären Messverfahren

Die Bestimmung der Permeabilität, die das Strömungsverhalten von Fluiden im Porenraum eines Gesteins quantifiziert, basiert bei laminarer Durchströmung parallel zur Probenachse auf der DARCY-Gleichung:

$$k = \frac{q \cdot \eta \cdot l}{A(p_1 - p_2)}$$

- mit
- k = Permeabilität (m²)
 - A = Querschnittsfläche (m²)
 - l = Länge der Probe (m)
 - η = dynamische Viskosität (Pa s)
 - q = gemessene Fließrate (m³/s)
 - p₁ = Druck auf Injektionsseite (N/m²)
 - p₂ = Druck an Probenausgang (N/m²)

Für die Durchströmung mit Gasen muss die Tatsache berücksichtigt werden, dass beim Strömen eines Gases durch den Porenraum eines Feststoffes eine Expansion des Gases längs des Strömungsweges stattfindet, so dass die Fließrate nicht konstant ist. Daher wird hier die Fließrate q₀ bei der jeweiligen Druckmessung p₀ gesetzt, für die bei kleinen Drücken mit ausreichender Genauigkeit gilt:

$$k = \frac{2 \cdot p_0 \cdot q_0 \cdot \eta \cdot l}{A(p_1^2 - p_2^2)}$$

- mit
- q₀ = gemessene Fließrate bei p₀ (m³/s)
 - p₀ = Druck bei Fließratenmessung (N/m²)

Prinzipiell stehen für die Durchströmung zylindrischer Proben mit einer Hochdruck- und Niederdruckseite zwei Probengeometrien zur Verfügung (Abb. 1).

Während bei der axialen Geometrie das Messfluid über die Stirnflächen appliziert wird und entlang der Probenachse strömt, erfolgt bei radialer Durchströmung die Einleitung des Messfluids über die Mantelfläche einer druckbeaufschlagten Zentralbohrung. In der Konsequenz unterscheiden sich beide Anordnungen in der Porendruckverteilung in Richtung der Fluidausbreitung.

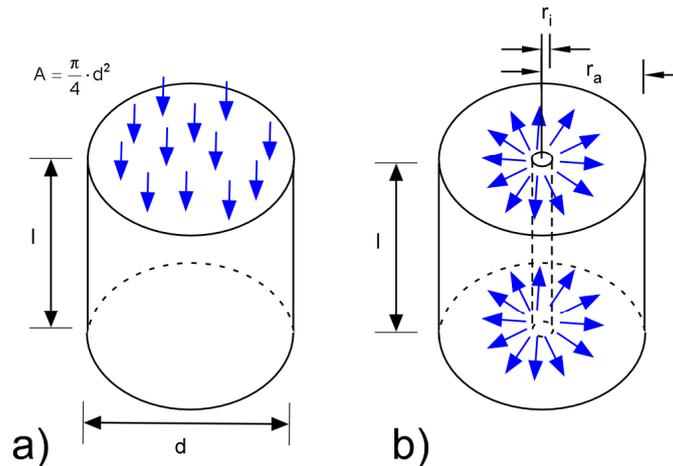


Abb. 1 Strömungsgeometrie zylindrischer Proben:

- a) axial: Einleitung des Messfluids über die Stirnfläche mit Ausbreitung entlang der Zylinderachse.
- b) radial: Abströmen über die Mantelfläche einer zentralen Injektionsbohrung und Sammlung der durchtretenden Fluidmenge an der Probenaußenfläche.

Abb. 2 zeigt die Ergebnisse einer Modellierung der Druckgefälle bei axialer und bei radialer Durchströmung. Es zeigt sich, dass bei axialer Durchströmung der mittlere Poren-
druck entlang des Ausbreitungswegs nicht linear abnimmt, wobei der mittlere Gasdruck
deutlich über dem einfachen Mittel aus Primär- und Sekundärdruck liegt. Daraus resul-
tiert bei der axialen Geometrie zum Probenende hin ein erhöhter Druckgradient. Dieser
ist rund 10-mal größer als im vorderen Teil der Probe, woraus im Endstück ein erhöhter
Strömungswiderstand resultiert. Ob dieser Effekt auch zu Turbulenzen führen kann, wie
von KANSY & POPP (2006) diskutiert wird, ist nicht einfach überprüfbar, da die effekti-
ven Strömungswege (Querschnitt bzw. Länge) zur Abschätzung einer Fließrate für eine
Bewertung anhand der Reynoldszahl nicht bekannt sind. Würde dieser Fall eintreten,
könnte das in der Konsequenz bedeuten, dass die solchermaßen bestimmten Permea-
bilitäten gegenüber den tatsächlichen reduziert wären.

Als Folge des Druckgradienten bei axialer Durchströmung kann gleichfalls davon aus-
gegangen werden, dass bei einem wirkenden Porendruck die Effektivspannungsvertei-
lung sich entlang der Probenachse ändert (vgl. KANSY & POPP, 2006). Dies könnte
Einfluss auf die Verformungseigenschaften der Probe haben.

Sehr viel günstiger ist die Situation bei der radialen Strömungsgeometrie. Hier ergeben
sich zwar im Bereich der Eintrittsfläche (Mantelfläche der Innenbohrung) sowie auf der

Probenaußenseite lokal erhöhte Druckgradienten, die aber insgesamt niedriger sind als bei der axialen Geometrie. Weiterhin zeigt der Vergleich zwischen axialer und radialer Durchströmung unter gleichen Bedingungen (identisches k und η , $p_i = p_1$, $p_a = p_2$ sowie gleiche Probenlängen l und Durchmesser d sowie einem Verhältnis von $l = 4 \times r_a$), dass die radiale Durchströmungsrate in Abhängigkeit vom Durchmesser der Mittelbohrung ($r_a/r_i = 8,5 - 25$) etwa 10 – 15mal so groß ist, wie die bei axialer Durchströmung. Dies bedeutet, dass die untere Messwertgrenze der Permeabilität bei Anwendung stationärer Durchströmungsverfahren mit radialer Strömungsgeometrie um eben diesen Faktor niedriger ist.

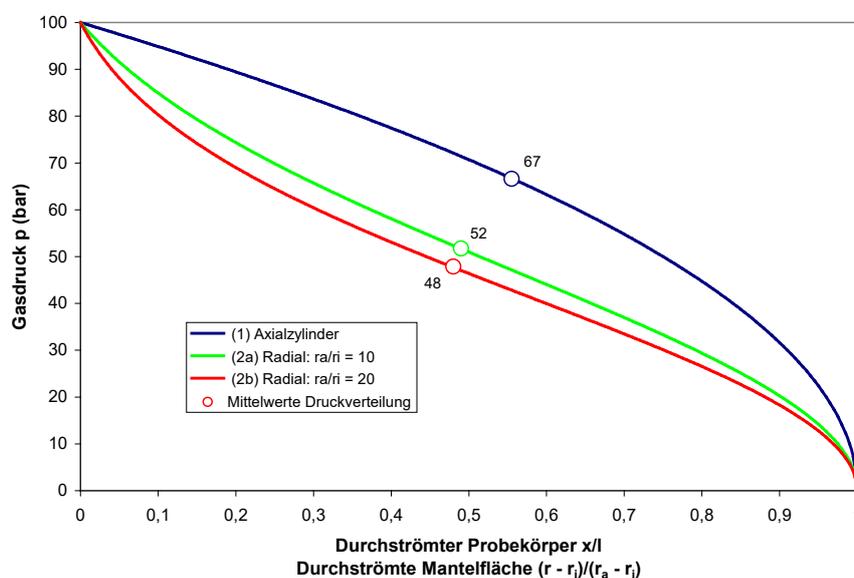


Abb. 2 Druckgefälle in einer zylindrischen Probe – Injektionsdruck = 100 bar und niederdruckseitig 1 bar: (1) Druckgradient bei axialer Strömung entlang der Zylinderachse; (2) Druckgefälle in einer gasdurchströmten Wandung bei radialer Durchströmung. Zusätzlich sind für die Strömungswege jeweils die Mittelwerte der Gasdrücke angegeben

Vorteilhaft ist ebenfalls, dass bei radialer Durchströmung Wegsamkeiten parallel zur Probenachse, d.h. zwischen Mantel und Probe wie bei axialer Durchströmung, zu vernachlässigen sind. Dabei wird vorausgesetzt, dass die Endflächen der Proben bei zentraler Gaseinleitung über eine Zentralbohrung hinreichend abgedichtet sind. Es muss gewährleistet sein, dass das Metallgewebe (oder Gaze), das auf der Mantelaußenfläche das durchtretende Messfluid auffangen soll, hinreichend durchlässig ist und dieser Vorgang bei der Belastung durch das Druckmedium nicht behindert wird. Da diese

Voraussetzungen nicht einfach apparativ umsetzbar sind, muss für bestimmte Versuchszwecke weiterhin die axiale Durchströmungsgeometrie eingesetzt werden.

Probenmaterial aus der Kontaktzone zwischen Gebirge und Bauwerk steht oft in Bohrkernen zur Verfügung, die senkrecht zur Kontaktzone erbohrt wurden. Auch bei im Labor hergestellten Proben stellt sich üblicherweise diese Geometrie ein. Soll die Permeabilität entlang der Kontaktzone bestimmt werden, wird dies im Allgemeinen nur in Versuchen mit radialer Durchströmung gelingen.

Lösungspermeabilität – Sättigung und Equilibrierung

Für die Analyse der Lösungspermeabilität unter äußerer Einspannung werden die ggfls. vorab gesättigten Probekörper (s.o.) in hydrostatische Kernhalter montiert. Durch einen kontrollierten Öldruck wird die Probe allseitig mit der gewünschten Einspannung belastet. Die Probe wird dabei durch einen flexiblen Schlauch von dem Druckmedium separiert.

Zur Vorbereitung der Messungen, also zur (endgültigen) Sättigung und Equilibrierung der Probe unter Einspannung, wird die Probe zunächst über einen längeren Zeitraum durchströmt. Dies kann in einer vergleichsweise einfachen Apparatur mit einseitiger Injektion der Lösung geschehen. Diese Art der Sättigung ist insbesondere bei Tonsteinen empfehlenswert, um mögliche Schädigungen durch Quellen unter Atmosphärendruck zu vermeiden. Der Equilibrierung der Probe wird unter konstanten Bedingungen Zeit gegeben, wobei die Dauer der Equilibrierung von den Materialeigenschaften und dem Einbauzustand der Probe abhängt und durchaus im Bereich von Wochen liegen kann.

Messung der Lösungspermeabilität

Nach Abschluss von Sättigung und Equilibrierung wird der Kernhalter mit dem Probekörper zum Prüfstand umgesetzt, möglichst ohne Änderung der Einspannung. Dies ist von Bedeutung, damit sich die Probe nicht wieder entspannt und um die Zeit für die anschließende Equilibrierung im eigentlichen Prüfstand möglichst kurz zu halten.

Der Prüfstand (Abb. 3) muss unbedingt unter Konstanttemperatur ($\pm 0.1^\circ\text{K}$) gehalten werden. Die Steuerung des Versuchs sollte räumlich getrennt davon erfolgen, um Störungen durch Erschütterungen, Temperaturschwankungen o.ä. im Prüfraum zu

vermeiden. Bei den hier zu messenden extrem niedrigen Fließraten von $< 100 \text{ nl/s}$ müssen derartige äußere Faktoren ausgeschlossen werden.

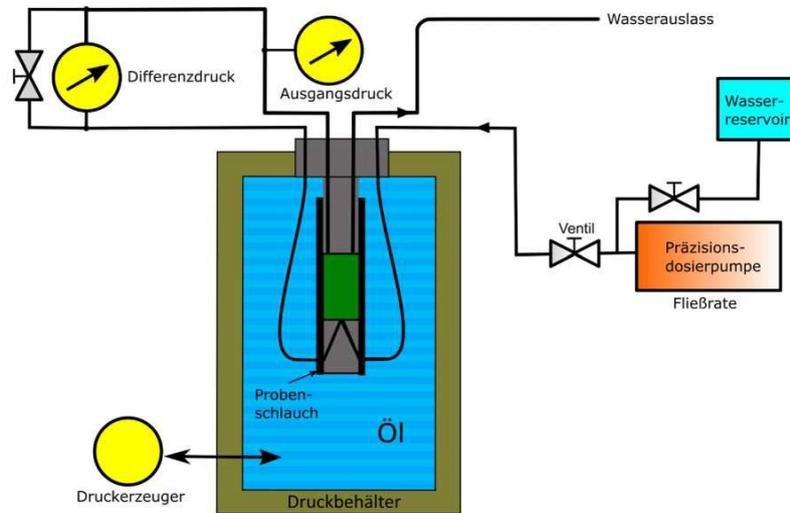


Abb. 3 Schema des Prüfstands zur Sättigung der Probe unter äußerer Einspannung und ggfls. Messung der Lösungspermeabilität gegen Atmosphäre

Nach Einbau in den Prüfstand wird ein exakt kontrollierter Differenzdruck über Eingangs- und Ausgangsseite der Probe mit Hilfe zweier Präzisionsspindelpumpen angelegt und anschließend dem Aufbau erneut Zeit zum Equilibrieren bis zum Erreichen stationärer Bedingungen gegeben. Der stationäre Zustand gilt als erreicht, wenn die Fließrate über einen Zeitraum von 24 Stunden um nicht mehr als 1% variiert. Abb. 4 zeigt schematisch den zeitlichen Verlauf einer Messung.

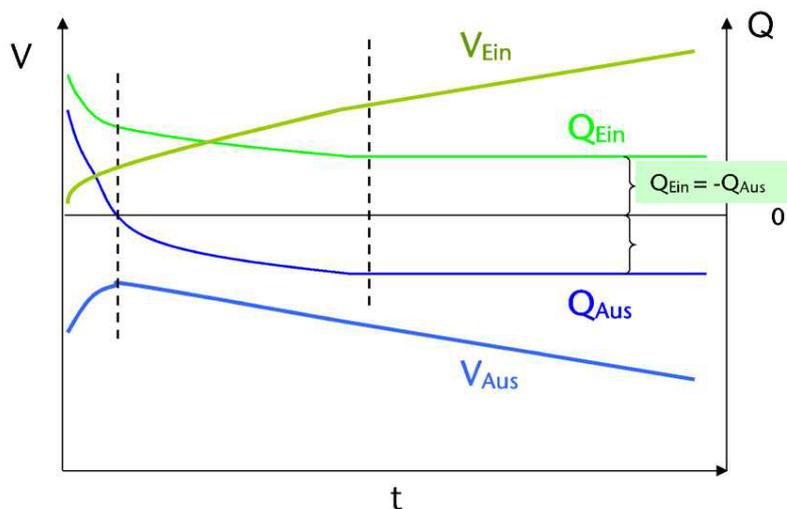


Abb. 4 Zeitlicher Verlauf einer Permeabilitätsmessung
 Q: Durchflussrate, V: Lösungsvolumen, t: Zeit

Messung des kapillaren Sperrdrucks

Der Messaufbau für die Bestimmung des kapillaren Sperrdrucks entspricht weitestgehend dem der Messung der Lösungspermeabilität. Die Probe verbleibt in der hydrostatischen Einspannung in der oben beschriebenen Apparatur. Die Probe wird erneut auf dem Niveau des initialen Porendrucks equilibriert. Nach erneuter Equilibrierung sämtlicher Parameter kann im nächsten Schritt der kapillare Sperrdruck bestimmt werden.

Die Messung des Sperrdrucks basiert auf der „modified continuous injection“ Methode (Meyn 1999). Hierbei wird unter Beibehaltung des allseitigen Drucks zunächst die Lösung einseitig von der Probe entfernt und durch ein Gas (zum Beispiel Stickstoff, Methan oder Wasserstoff) ersetzt. Dieser Vorgang kann durch die Nutzung einer zweiten Kapillare erheblich beschleunigt werden, da dann die Lösung nicht durch die Probe abtransportiert werden muss (Abb. 3).

Zu- und Ableitung der Lösung erfolgen mittels stirnseitig auf den Probezylinder aufgesetzter Edelstahlzylinder über jeweils zwei Edelstahlkapillaren. Bei laufender Permeation wird jeweils eine Kapillare für die Strömung und die zweite Kapillare für die Messung des Differenzdrucks über der Probe verwendet. Die Kapillaren, über die der Differenzdruck gemessen wird, werden also nicht durchströmt, um den Fließwiderstand der Kapillaren nicht in die Differenzdruckmessung einzubeziehen. Die sich bei der vorgegebenen Druckdifferenz einstellende Fließrate wird über den Kolbenvorschub der Präzisionspumpen gemessen. Aufgrund der hohen Auflösung und präzisen Regelung können kleinste Fließraten ab 18 nl/min zuverlässig gemessen werden. Um einen kontinuierlich steigenden Differenzdruck über der Probe aufzubauen, wird ausgangsseitig der Druck langsam abgesenkt. Dabei muss die Absenkrate umso kleiner gewählt werden, je kleiner die Permeabilität der Probe ist.

Diese sehr langsame Druckrampe ermöglicht überschüssiger Lösung aus der gesamten Probe abzufließen. Diese zu drainierende Lösung stammt aus vier Quellen:

1. Drainage der Restlösung von der gasbeaufschlagten Probenseite. Dies tritt lediglich zu Beginn des Differenzdruckaufbaus auf.
2. Ausdehnung des kompressiblen Porenwassers in Folge des abnehmenden mittleren Drucks im System.

3. Einengung des Porenraumes (compressibility of pore volume), hervorgerufen durch die größer werdende effektive Belastung der Probe.
4. Deformation der Poreneintrittsmenisken in den Porenraum.

Aus den Punkten 1 und 4 ist ersichtlich, dass der scheinbar registrierte Gasfluss auch vor Überschreiten des Sperrdrucks an keiner Stelle gleich null ist (siehe Abb. 5). Hinzu kommen noch diffusive Verluste durch Lösung des Gases in das Porenfluid.

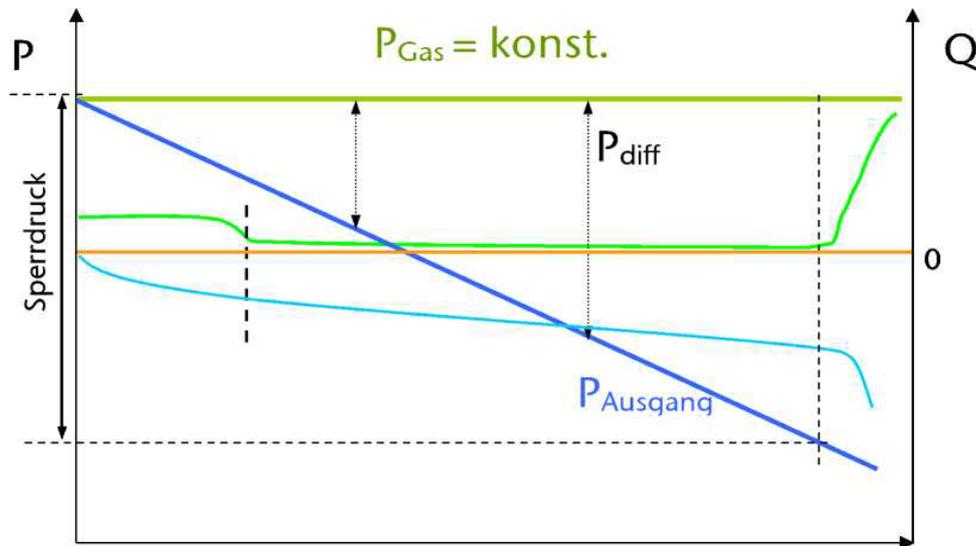


Abb. 5 Zeitlicher Verlauf der Sperrdruckbestimmung

Ist der kapillare Sperrdruck überschritten, tritt Gas in die Probe ein und die Fließrate steigt stark an (hellgrüne Linie in Abb. 5). An der Ausgangsseite tritt zeitlich verzögert ebenfalls eine Erhöhung der Fließrate ein (hellblaue Linie mit negativem Vorzeichen in Abb. 5). Bei hinreichend kleinem Druckabsenkungsgradienten kann aus dem Differenzdruck über der Probe zum Zeitpunkt des Gaseintritts direkt der Sperrdruck abgelesen werden.

Literatur

ASTM International D 4543-19 (2019): Preparing rock core as cylindrical specimens and verifying conformance to dimensional and shape tolerances.

DIN EN 1936:2007-02 (2007): Prüfverfahren für Naturstein - Bestimmung der Reindichte, der Rohdichte, der offenen Porosität und der Gesamtporosität.

DIN EN 12390-1 (2021): Prüfung von Festbeton - Teil 1: Form, Maße und andere Anforderungen für Probekörper und Formen.

DIN EN ISO 17892-1 (2022): Geotechnische Erkundung und Untersuchung - Laborversuche an Bodenproben - Teil 1: Bestimmung des Wassergehalts.

DIN EN ISO 22282-6 (2012): Geotechnische Erkundung und Untersuchung - Geohydraulische Versuche - Teil 6: Wasserdurchlässigkeitsversuche im Bohrloch unter Anwendung geschlossener Systeme.

Kansy, A, Popp, T. (2006): Modellentwicklung zur Gaspermeation aus unterirdischen Hohlräumen im Salzgebirge. BMBF-Vorhaben 02 C 0952. Vortrag 7. Projektstatusgespräch zu BMBF/BMWi-geförderten FuE-Vorhaben auf dem Gebiet der Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen, Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung am 03. – 04.05.2006 in Karlsruhe.

Meyn, V. (1999): Die Bedeutung des Sperrdruckes (threshold pressure) für den Fluidtransport in niedrigstpermeablen Gesteinen: Experimentelle und theoretische Aspekte. DGMK-Tagungsbericht 9901, 255-264.

1.11

A.-W. Gutsch¹, E. Rigo², H. Alberts²:

Untersuchungsmethoden zur Charakterisierung von mineralischen Verschlussbaustoffen

¹ *Materialprüfanstalt für das Bauwesen Braunschweig (MPA Braunschweig), Braunschweig, Deutschland*
Email: a.gutsch@ibmb.tu-bs.de

² *MPA Braunschweig, Braunschweig, Deutschland*
Email: e.rigo@ibmb.tu-bs.de

Zusammenfassung

Die Herstellung von Verschlussbauwerken aus mineralischen Baustoffen wie Salzbeton und Magnesia-Binder erfordert umfassende Kenntnis der anforderungsrelevanten Materialeigenschaften. Es hat sich gezeigt, dass viele Eigenschaften mit den im Bauwesen bewährten Verfahren charakterisiert und ggf. für die Qualitätssicherung während des Einbaus eingesetzt werden können. Dazu zählen die Verarbeitungseigenschaften, die thermischen Eigenschaften wie Temperaturdehnung, Wärmekapazität und Wärmeleitung sowie mechanische Eigenschaften wie Druck- und Zugfestigkeiten und Elastizitätsmodul. Für einige anforderungsrelevante und für die Nachweisführung elementare Eigenschaften wurden Sonderverfahren zur Charakterisierung der Materialeigenschaften entwickelt. Insbesondere für die Bemessung von Abdichtbauwerken während der Erhärtung und zur Abschätzung der Rissbildung ist eine TM-Simulation elementar. Dazu nötige Eingangsparameter wie die zeitliche Wärmeentwicklung (mittels adiabatscher Kalorimetrie), Kriech- bzw. Relaxationseigenschaften (Druck- und Zugbelastung), Schwinden und autogenes Schwinden wurden basierend auf Experimenten bereitgestellt. Zusätzlich müssen Eigenschaften experimentell ermittelt werden, die das Verbundverhalten des Baustoffes zum Gebirge charakterisieren, wie z.B. Haftzugfestigkeiten von Verbundkörpern. Die Nachweisführung zur Langzeitstabilität unter besonderer Berücksichtigung der chemischen, hygrischen sowie für den Stofftransport relevanten Eigenschaften erfolgt über Simulationsmodelle. Hier wird insbesondere auf Trocken- und Sättigungsversuche eingegangen.

Einleitung

Zur Herstellung von Verschlussbauwerken für Endlager radioaktiver Stoffe werden in Deutschland bislang vorrangig mineralische Baustoffe vorgesehen, weil diese eine hohe Affinität zu den bisherigen geologischen Endlagerformationen haben. Zur Abschätzung der Herstellung, des Baustoffeinbaus sowie der Dauerhaftigkeit und Langzeit-Sicherheit und für Genehmigungsverfahren wurden für diese Baustoffe in der Vergangenheit alle maßgeblichen und anforderungsrelevanten Materialeigenschaften zur Werkstoffcharakterisierung untersucht.

Bei den mineralischen Baustoffen handelt es sich um Salzbetone mit Portlandzement als Bindemittel und um Magnesia-Binder. Auch wenn sich diese beiden mineralischen Baustoffe und deren Materialeigenschaften unterscheiden, so sind die für die Herstellung und Nachweisführung relevanten Materialeigenschaften ähnlich. Im vorliegenden Beitrag werden wesentliche Materialeigenschaften zur Charakterisierung von mineralischen Verschlussbaustoffen zusammengestellt und ein Überblick über notwendige Untersuchungen gegeben.

Allgemeines

Die notwendigen Untersuchungen zur Charakterisierung der maßgeblichen Materialeigenschaften von Verschlussbaustoffen ergeben sich zum einen aus der notwendigen Charakterisierung des Baustoffs selbst oder hängen zum anderen von der Anwendung, der Herstellung, den Anforderungen oder von Nachweisverfahren, z.B. der thermischen, hygrischen, mechanischen und chemische (THMC-) Prozesse ab.

Folgende Materialeigenschaften von Verschlussbaustoffen haben sich in der Vergangenheit als wesentlich herausgestellt:

- Eigenschaften im frischen angemischten Zustand, u.a. zur Abschätzung von Verarbeitung, Transport und Einbau sowie zur Qualitätskontrolle am Übergabepunkt Herstellung – Transport / Einbau
- Thermische und hygrische Eigenschaften
- Mechanische Eigenschaften
- Eigenschaften zu Baustoffstabilität und chemischer Beständigkeit

Die letzten drei Themengruppen sind besonders für die Nachweisführung der Langzeitstabilität von Bedeutung. Nachfolgend wird auf die Materialeigenschaften und deren Untersuchung näher eingegangen.

Bestimmung von Materialkennwerten im frischen angemischten Zustand sowie an Ausgangsstoffen

Zur Abschätzung von Verarbeitung, Transport und Einbau sowie zur Qualitätskontrolle am Übergabepunkt Baustoffherstellung – Transport / Einbau sind die Baustoffeigenschaften im frischen Zustand wichtig. Dazu gehören u.a. Frischbaustofftemperatur, Konsistenz, Homogenität, Neigung zum Absondern von Flüssigkeit und andere. Für die Konsistenzprüfung können Prüfverfahren von Normalbeton verwendet werden, z.B. DIN EN 12350-ff, Abb. 1 – 2, Versuche zum Ausseigern von Flüssigkeit s. Abb. 3. Diese Verfahren sind baustellengerecht und im Bauwesen verbreitet. Sie haben sich auch bei Bestimmung von Kennwerten von Salzbetonen und Magnesia-Binder bewährt. Ggf. müssen insbesondere die Konsistenzprüfverfahren noch geringfügig angepasst werden, da die bisher untersuchten Salzbetone und Magnesia-Binder sehr dünnflüssig eingestellt wurden, weil sie zum einen in Rohrleitungen zum Einbauort gepumpt wurden und/oder weil sie am Einbauort selbstentlüftend und selbstnivellierend sein sollen. Dementsprechend dünnflüssig wurde die Konsistenz eingestellt.

Bei Mischprozessen von sehr dünnflüssig eingestellten Baustoffen hat sich gezeigt, dass die Konsistenz häufig so gering ist, dass die Scherkräfte beim Mischen mit dem üblichen Mischer oft nicht ausreichen, um einen homogenen und voll aufgeschlossenen Baustoff anzumischen. Häufig langen dann in dünnflüssigen Baustoffmischung noch Nuss- oder Hühnereigröße und im Inneren trockene Klumpen vor, die durch zusätzliche Maßnahmen aufgebrochen werden mussten. Bei längeren Pumpstrecken konnten derartige Klumpen im Regelfall vollständig aufgelöst werden, so dass nach dem Pumpen eine homogene Baustoffmischung vorlag.



Abb. 1 Fließrinne (links) und Luftporenmessgerät (rechts)



Abb. 2 Bestimmung Setzfließmaß bzw. Ausbreitmaß

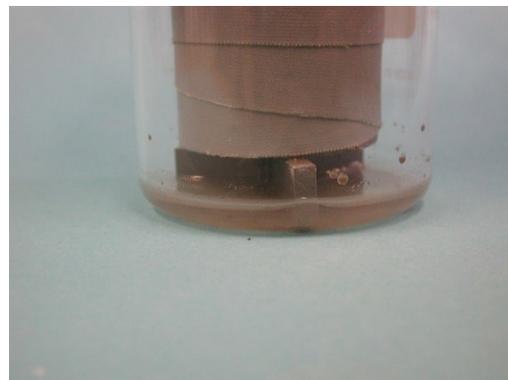


Abb. 3 Bestimmung Ausseigern von Lösung aus Salzbeton

Neben der Bestimmung von Materialkennwerten am gemischten Baustoff sind zur Qualitätskontrolle auch Prüfungen an den Ausgangsstoffen notwendig. Diese ergeben sich entweder durch die Ausgangsstoffe selbst und die entsprechenden Herstellungsnormen oder sie wurden im Rahmen von Verfüllmaßnahmen im Endlagerbereich aus Erfahrung oder aufgrund von Forschungserkenntnissen festgelegt.

Thermische Eigenschaften

Für die Herstellung von Abdichtbauwerken sind relativ große Bauteilquerschnitte von mehreren Metern Querschnitt und Länge erforderlich. Aufgrund der großen Abmessungen ist bei der Erhärtung von mineralischen Verschlussbaustoffen wegen der exothermen Erhärtungsreaktion mit einer erheblichen Wärmefreisetzung und dementsprechend mit einer nennenswerten Bauteilaufheizung von 20 – 50 K zu rechnen. Angrenzende Bauteile oder das Gebirge werden dementsprechend aufgeheizt. Da sich während der Erhärtung gleichzeitig die mechanischen Eigenschaften des Abdichtbaustoffes verändern, können thermische Spannungen entstehen, die z.B. bei Rissbildung auch die hydraulischen Eigenschaften des Baustoffs oder Bauteils beeinflussen.

Deshalb müssen Temperaturdehnung, Wärmekapazität, Wärmeleitung sowie die (adiabatische/teiladiabatische) Wärmeentwicklung / Wärmefreisetzung des Baustoffs während der Erhärtung untersucht werden, um die Kennwerte zu ermitteln.

Während zur Bestimmung von Temperaturdehnung, Wärmekapazität und Wärmeleitung von Werkstoffen eingeführte und genormte Verfahren existieren, handelt es sich bei der experimentellen Ermittlung der Wärmeentwicklung und deren zeitlichem Verlauf um Sonderverfahren. Üblich ist die Ermittlung in teiladiabatischen Versuchsaufbauten, bei denen ein gerätebedingter Wärmeabfluss an die Umgebung stattfindet, der zur Ermittlung einer adiabatischen Wärmeentwicklungskurve anschließend rechnerisch eliminiert werden muss. Apparativ deutlich aufwändiger sind adiabatische Kalorimeter, bei denen ein Wärmeabfluss an die Umgebung regelungstechnisch unterbunden wird. Ein Beispiel für ein adiabatisches Kalorimeter zur Untersuchung von Beton ist in Abb. 4 dargestellt.

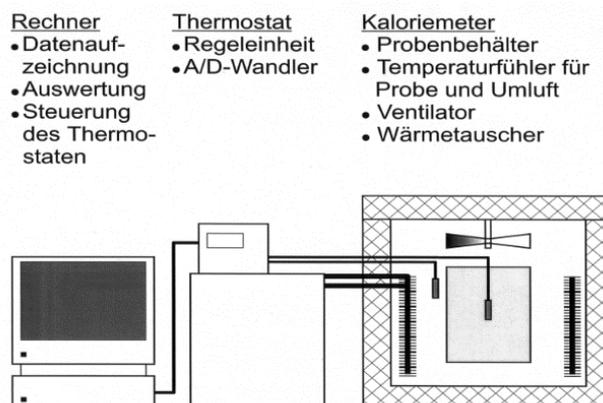


Abb. 4 Adiabatisches Kalorimeter der MPA Braunschweig

Mechanische Kennwerte

Die mechanischen Kennwerte von Abdichtbaustoffen sind entscheidend für die Bemessung und Nachweisführung von Verschlussbauwerken. Sie können in folgenden Gruppen zusammengefasst werden:

- Mechanische Kurzzeiteigenschaften
 - Druck- und Zugfestigkeit sowie Elastizitätsmodul und deren Entwicklungen in Abhängigkeit der Erhärtung
- Mechanische Langzeiteigenschaften
 - Langzeiteigenschaften mit Krafteinwirkung: Kriechen oder Relaxation
 - Langzeiteigenschaften ohne Krafteinwirkung: Schwinden (mit gleichzeitiger Trocknung) und autogenes Schwinden (ohne Trocknung / mit Luftabschluss)
 - Langzeiteigenschaften mit Temperatureinwirkung sowie mit und ohne Kraft
- **Rissverhalten**, Neigung zu Eigenspannungsrisssbildung
 - Verbundeigenschaften zu angrenzenden Bauteilen oder Gestein

Die mechanischen Kurzzeiteigenschaften (Druck- und Zugfestigkeit, Druckelastizitätsmodul) können für mineralische Baustoffe im Regelfall z.B. nach Prüfnormen für Festbeton ermittelt werden, s. DIN EN 12390 mit allen Teilen, Abb. 5.



Abb. 5 Druckprüfung an mineralischem Baustoff

Für die Simulation von temperaturinduzierten Zwangspannungen während der Erhärtungsphase und wegen der Zwangbehinderung von Temperaturdehnungen durch angrenzende Bauteile sind nicht nur Regelfestigkeiten, z.B. 28- oder 56-Tage-Werte von

Interesse, sondern es ist die Entwicklung der mechanischen Kennwerte während der gesamten Erhärtungsdauer wichtig. Dies führt dazu, dass Festigkeitswerte im Alter von 1 - 2, 3, 7, 14, 28, 56 und ggf. 90 und 120 Tagen zu ermitteln sind. Für Normalbetone mit üblicher Gesteinskörnung wurde zudem herausgefunden, dass sich die mechanischen Eigenschaften Druck- und Zugfestigkeit sowie Elastizitätsmodul nicht gleich entwickeln, sondern dass sich Elastizitätsmodul und Zugfestigkeit schneller entwickeln als die Druckfestigkeit. Gleiches wurde für Salzbeton festgestellt.

Für Salzbeton wurde in der Vergangenheit das Kriechen sowohl unter Zug- als auch unter Druckbeanspruchung untersucht, Abb. 6. Die Bestimmung des Druckkriechens erfolgte dabei zunächst gemäß üblichen Prüfabläufen für Normalbeton im Bauwesen [DAfStb-Heft 422] in einem Erstbelastungsalter von 28 oder 56 Tagen. Diese Alters- und Belastungsrandbedingungen können für eine Bemessung von Abdichtbauwerken im erhärteten Zustand noch ausreichen. Für die Bemessung von Abdichtbauwerken, die die Erhärtungsphase und die temperaturbedingten Zwangsspannungsentwicklungen mit abbilden muss, um die Rissbildung, Durchlässigkeit und Dauerhaftigkeit abschätzen zu können, muss jedoch auch das Zugkriechverhalten zu sehr frühen Erhärtungszeitpunkten bekannt sein, weil dies als Eingangsparameter in TM-Simulationen zu implementieren ist. Für Salzbeton hat sich weiterhin herausgestellt, dass das Kriechen unter Zugbelastung deutlich kleiner als das Kriechen unter Druckbelastung ist. Dies ist im Hinblick auf die erhärtungsbedingte Temperaturspannungsentwicklung ungünstig, weil Zugspannungen, die zu Rissen führen können, durch visko-elastische Effekte unter Zugbeanspruchung vermindert abgebaut werden.

In der Vergangenheit wurden für Salzbetone auch Schwindeffekte untersucht. Dabei wurden zunächst Trocknungsschwindeffekte untersucht, weil dies der Standard für Normalbetone im Bauwesen ist und da hierfür einschlägige Prüfverfahren existieren.

Bei großen Bauteilquerschnitten mit mehreren Metern Abmessung spielen Trocknungseffekte beim Schwinden jedoch eine untergeordnete Rolle. Dementsprechend ist das autogene Schwinden, also das Schwinden unter Luftabschluss (also mit einer Verpackung) von Bedeutung. Bei umfangreichen Untersuchungen hat sich in der Vergangenheit herausgestellt, dass das autogene Schwinden von Salzbeton um ein Vielfaches größer als von Normalbetonen oder Hochfesten Normalbetonen ist. Es ist sogar so groß, dass das autogene Schwinden größer als etwaige Temperaturdehnungen während der Aufheiz- und anschließenden Abkühlphase der Erhärtung sein kann. Deshalb ist für Salzbeton das autogene Schwinden neben der Temperaturdehnung die dominierende

Größe bei der Entwicklung von Zwangsspannungen während der Erhärtung. Untersuchungen der MPA Braunschweig haben weiterhin ergeben, dass das autogene Schwinden von Salzbeton durch die geeignete Wahl von Zementen oder durch mineralische Zusatzstoffe wie z.B. Kalk oder andere mineralische Stoffe reduziert werden kann.

Für die Entstehung von Zwangsspannungen während der Baustoffhärtung sind auch die Zwangrandbedingungen zu angrenzenden Bauteilen und/oder zum Gebirge entscheidend. Wenn es sich bei dem angrenzenden Gebirge um ein Salinar handelt, spielt die Mikrorissbildung durch Anschnitte eine Rolle. Bei einem flächigen Aufbringen von einem Verschlussbaustoff auf ein Salinar entsteht eine Verbundzone, die im Regelfall geringere Festigkeiten aufweist als der Abdichtungsbaustoff oder das Gebirge. Für Salzbetone wurden deshalb in der Vergangenheit Verbundversuche durchgeführt, bei denen der Verschlussbaustoff direkt auf das frisch angeschnittene Salinar aufgebracht wurde und dann eine Gesamtprobe aus Baustoff, Verbundzone und Salinar geprüft wurde, Abb. 7. An diesen Proben wurde die Haftzugfestigkeit ermittelt. Alternativ wären Haftscherversuche ebenso möglich gewesen. Für TM-Simulationsberechnungen sind auch hier die Haftzugentwicklung ab der frühen Erhärtungsphase wichtige Eingangswerte.

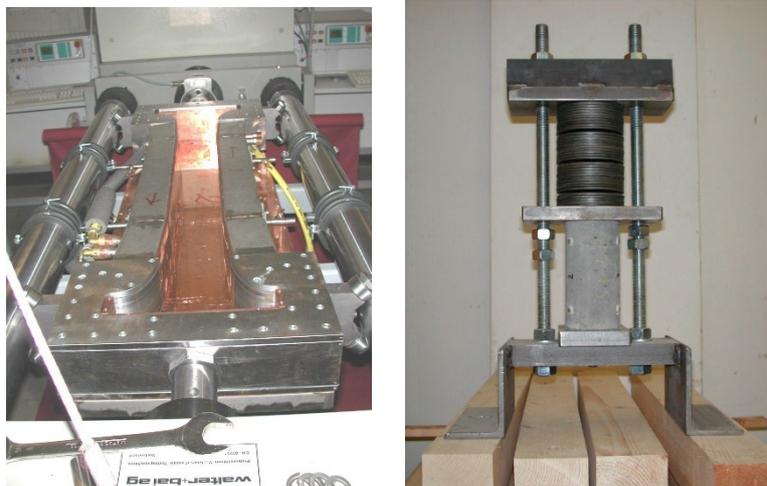


Abb. 6 Zugkriechversuchsstand (links) und Druckkriechversuchsstand (rechts)

An der MPA Braunschweig wurden in der Vergangenheit in erster Linie nur einaxiale Belastungsversuche durchgeführt. Für die Bemessung und Nachweisführung von Abdichtbauwerken mit mineralischen Baustoffen müssen jedoch auch die Werkstoffeigenschaften unter mehrachsigen Beanspruchungen untersucht werden. Diese Untersuchungen wurden bisher von Geomechanik-Laboren ausgeführt.



Abb. 7 Verbundversuch Salzbeton auf Salinar (links) und Zug-Elastizitätsmodul-Probe (rechts)

Bei mehrachsigen Versuchen kann ebenfalls in Kurzzeitversuche und Langzeitversuche unterschieden werden, wobei bei letzteren zeitabhängige visko-elastische oder gleichzeitig ablaufende thermische Effekte untersucht werden können. Auf mehrachsige Versuche wird an dieser Stelle nicht eingegangen, sondern auf Berichte von Geomechanik-Laboren verwiesen.

Baustoffstabilität und Beständigkeit

Die Nachweisführung der Langzeitstabilität erfordert Kenntnisse über eine Reihe von Materialeigenschaften und wie sie sich unter den gegebenen korrosiven Bedingungen verändern. Hier sind neben der Ermittlung der Materialeigenschaften auch Simulationsberechnungen unabdingbar, die die Berechnung der thermodynamischen Gleichgewichtszustände mit der Simulation von Transportvorgängen im Salzbeton oder Magnesiabinder kombinieren, um die großen zu betrachtenden Zeiträume abzubilden. Zu den Simulationsberechnungen sei z.B. auf das Simulationsmodell TRANSREAC verwiesen.

Folgender Materialeigenschaften sollten mindestens für eine zuverlässige Nachweisführung/ Simulationsberechnung valide bestimmt werden:

- Kenndaten zu Transportprozessen (z.B.: Diffusionskoeffizienten, Sorptionseigenschaften, Wasseraufnahmen, Luftporengehalt, Porengrößenverteilung, Wasserdampfdiffusion, Permeabilitäten)
- Thermische Eigenschaften (Wärmeausdehnungskoeffizienten, Wärmeleitfähigkeiten, spezifischen Wärmekapazitäten, Übergangskoeffizienten)

- Mineralogische Eigenschaften (Phasenzusammensetzung, Gefügebeschreibung)
- Untersuchungen zur Veränderung von Struktur und Gefüge bei Beaufschlagung mit Medien (z.B. mit Hilfe von Mikroskopie, Röntgendiffraktometrie, FTIR Spektroskopie, Porengrößenverteilung)

In den letzten Jahren/Jahrzenten wurden Salzbeton und Magnesiabinder hinsichtlich der genannten Eigenschaften intensiv auch an der MPA Braunschweig untersucht. Im Folgenden wird auf Herausforderungen bei der Untersuchung von Salzbetonen eingegangen, die sich aus der Dichtigkeit des Salzbetons ergeben.

Für eine Vielzahl von Untersuchungen müssen die Probekörper getrocknet bzw. gesättigt werden. So müssen z.B. bei der Bestimmung des Diffusionskoeffizienten gesättigte Probekörper vorliegen, um andere Transportvorgänge wie kapillares Saugen auszuschließen, da ansonsten zu hohe Diffusionskoeffizienten ermittelt werden. Bei Salzbetonen handelt es sich um besonders kompaktes und dichtes Material, so dass sehr niedrige Diffusionskoeffizienten zu erwarten sind und der Messfehler aufgrund des Einflusses des kapillaren Saugens sehr hoch wäre. Experimentell muss demnach sehr intensiv an einer vollständigen Sättigung der Probekörper gearbeitet werden, um den Einfluss des kapillaren Saugens nahezu vollständig ausschließen zu können. Dies kann sichergestellt werden, indem die Sättigung bzw. Trocknung erst nach der Einstellung thermodynamischer Gleichgewichtsbedingungen abgewartet wird. Zusätzlich muss bei der Wahl der Sättigungsbedingungen bzw. Trocknungsbedingungen darauf geachtet werden, dass sich die Mikrostruktur der Probekörper möglichst wenig ändert, d.h. es müssen schonende Bedingungen wie z.B. niedrige Temperaturen, Arbeiten bei Normaldruck und die Einhaltung möglichst kurzer Zeiträume eingehalten werden. Anhand dieser Anforderungen lässt sich schon erkennen, dass die Ermittlung von Transportkennwerten, besonders von sehr dichten Materialien, ohne eine Änderung der Mikrostruktur und damit einhergehend eine Änderung der Transportkennwerte real nicht möglich ist und diese Kennwerte mit größeren Unsicherheiten behaftet sind, die in die Nachweisführung der Langzeitstabilität Eingang finden. Dazu Folgende Beispiele:

Für die Trocknung von Salzbeton (zylindrische Probekörper $d = 100 \text{ mm}$ $h = 50 \text{ mm}$) wurden die Proben sehr schonend bei 40 °C und $33 \text{ % rel. Luftfeuchte}$ im Klimaschrank 336 Tage belassen. In dieser Zeit ist der Gleichgewichtszustand nicht eingetreten, s. Abb. 8.

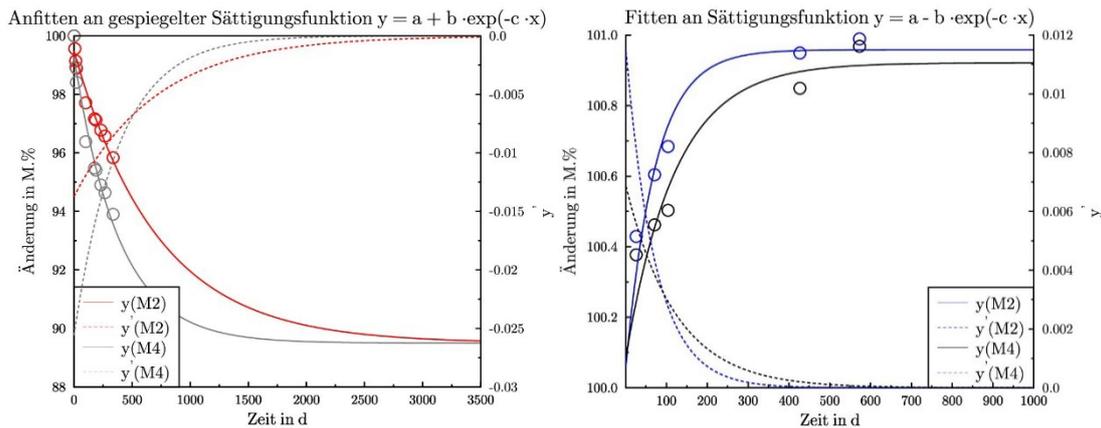


Abb. 8 Links: An den Trocknungsverlauf für Salzbetonproben angepasste Sättigungsfunktion. (Getrocknet wurde bei 40 °C und 33 % rel. Luftfeuchte im Klimaschrank)
Rechts: Angepasste Sättigungsfunktion für Salzbeton an die Messergebnisse von Proben mit langsamster und schnellster Sättigungsgeschwindigkeit

An die einzelnen Messpunkte in Abbildung 8, links wurde eine gespiegelte Sättigungskurve angepasst. Es wurde der aus Trocknungsversuchen bei 90 °C zu erwartende Endtrocknungszustand angenommen. Folgt der weitere Verlauf der Trocknung der angepassten Kurve sind Trocknungsdauern von mehreren Jahren zu erwarten.

Bei der Trocknung von Salzbeton (Probekörpergröße 70 mm * 50 mm * 20 mm) bei 90 °C wurde nach etwa 300 Tagen ein Gleichgewicht erreicht. Die Masse änderte sich auf 90 M.%. Bei der Exposition der Probekörper ist bei 90 °C und der Einwirkungsdauer von 300 Tagen mit einer signifikanten Änderung der Mikrostruktur und damit der Transportkennwerte zu rechnen.

Für Sättigungsversuche von Salzbeton (zylindrische Probekörper d = 100 mm, h = 50 mm) in NaCl-Lösung Typ I wurden die Proben 14 Tage unter Wasser bei vermindertem Druck (25 - 50 mbar) im Exsikkator bei 20 °C gelagert und dann bei Normaldruck weiterhin im Exsikkator belassen. Selbst nach über 400 Tagen wurde eine kontinuierliche geringe Massezunahme von 0,8 - 1,0 M.% beobachtet. Es ist davon auszugehen, dass eine Einstellung eines Sättigungsgleichgewichtes nach über 400 Tagen nicht erfolgt ist. An die einzelnen Messpunkte wurde eine Sättigungskurve angepasst (siehe Abbildung 8, rechts). Demnach sind Sättigungsdauern von 800 Tagen zu erwarten.

Die Bestimmung von Diffusionskoeffizienten kann stationär oder instationär erfolgen. Aufgrund der sehr dichten Struktur von Salzbeton bietet sich das instationäre Verfahren an, bei dem die Eindringprofile von Ionen/Teilchen zu verschiedenen Zeitpunkten ermittelt und dann mit dem 2. Fick'sche Gesetz der Diffusionskoeffizient bestimmt wird. Zur Ermittlung des Eindringprofils der Ionen kann die μ -RFA genutzt werden. Ihre große Stärke liegt in der sehr hohen örtlichen Auflösung der Messpunkte. Aufgrund dessen ist die Verwendung der μ -RFA an sehr dichten Salzbetonen vorteilhaft, da aufgrund der hohen Auflösung der Untersuchungszeitraum gegenüber gröber auflösenden Methoden erheblich reduziert werden kann. Hier sollen beispielhaft Elementverteilungen von Chlor und Calcium zur Demonstration der Leistungsfähigkeit der μ -RFA gezeigt werden (siehe Abbildungen 9 und 10). Aus der Elementverteilung von Chlor und Calcium kann die Zementmatrix klar vom Salzzuschlag unterschieden werden, da der Salzzuschlag als Cluster erkennbar ist, wobei z.B. die Verteilung von Calcium komplementär zur Chlor-Verteilung ist. Beim Eindringen einer Chloridlösung (Lösung Typ I) in Salzbeton kann festgestellt werden, dass sich z.B. das Element Calcium abreichert und das Element Chlor an der Probenoberfläche angereichert wird.

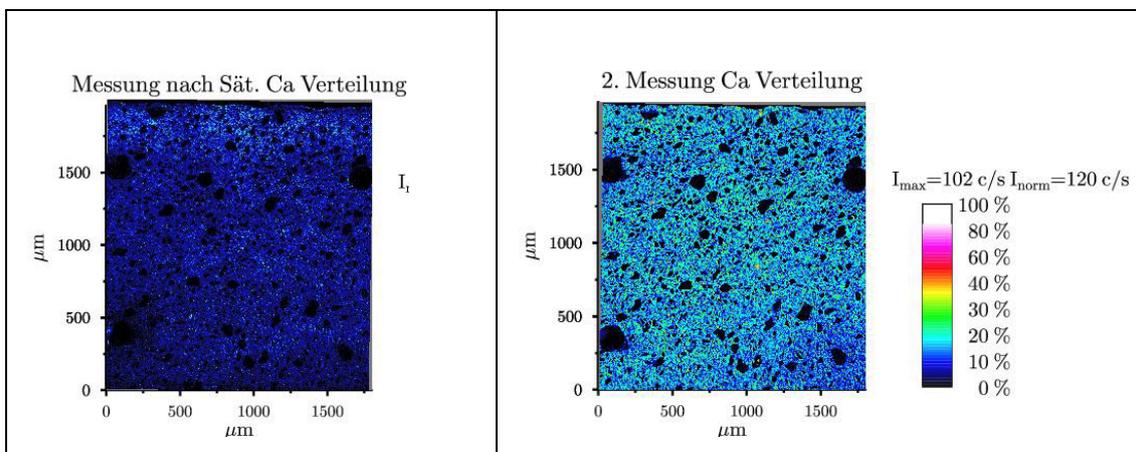


Abb. 9 Calcium-Verteilung eines Salzbetons vor (rechts) und nach Einlagerung (links) in eine Salzlösung

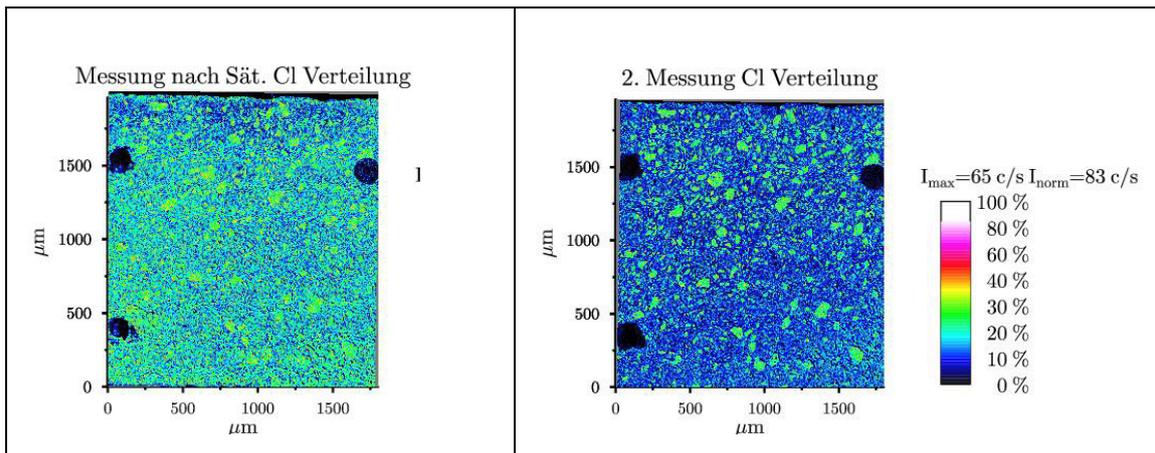


Abb. 10 Chlor-Verteilung eines Salzbetons vor (rechts) und nach Einlagerung (links) in eine Salzlösung

Die instationäre Ermittlung des Diffusionskoeffizienten oder die Untersuchung der Migration von Stoffen in den Salzbeton wird z.B. durch Einlagerungsversuche realisiert. Nach der Einlagerung wird der Probekörper aufgebrochen und das Eindringprofil ermittelt. Dazu ist die Oberfläche der geteilten Probekörper möglichst zu polieren. Polierte Oberflächen bieten bei der Verwendung der μ -RFA die beste Auflösung und Genauigkeit. Beim Polieren der Oberflächen kommt es jedoch zum Verschmieren und damit zur Veränderung des Eindringprofils. Die sich daraus ergebenden Unsicherheiten sind in die Nachweisführung der Langzeitstabilität zu berücksichtigen. Es wurden Experimente mit Probekörper durchgeführt, die vor der Einlagerung gespalten und die Oberflächen poliert wurden, um die o.g. Verschmierung zu verhindern. Dazu wurden die gespaltenen Probekörper wieder zusammengepresst, in eine Lösung eingelagert und danach das Eindringprofil bestimmt. Diese Untersuchungen zeigten jedoch, dass im Labormassstab der Pressdruck nicht ausreichte, um den Spalt zwischen den Probekörperhälften dicht zu verschließen und das Eindringen der Lösung durch den Spalt zu verhindern.

Literatur

DIN EN 12350, Prüfung von Frischbeton (alle Teile)

DIN EN 12390, Prüfung von Festbeton (alle Teile)

DAfStb-Heft 422, Prüfung von Beton und Empfehlungen und Hinweise als Ergänzung zu DIN 1048

Diverse Berichte der MPA Braunschweig zu Untersuchungen an Salzbeton und Magnesiabinder im Auftrag von BfS und BGE (auftragsbezogen, nicht veröffentlicht)

Langzeitversuche - Kriechverhalten von M4-Salzbeton aus dem ERAM

Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover, Deutschland

Email: werner.graesle@bgr.de

Zusammenfassung

- Die Zeitcharakteristik uni- und triaxialer Kriechversuche an M4-Salzbeton folgt einem Potenzgesetz. Die beobachteten Verläufe sind als volumentreues deviatorisches Kriechen interpretierbar, während relevante Beiträge von Kompaktionskriechen ausgeschlossen werden können.
- Die Bestimmung der Materialparameter (inkl. ihrer asymptotischen Standardfehler) ist durch Anpassung an den ε -Datensatz möglich (die Anpassung an den $\dot{\varepsilon}$ -Datensatz wäre theoretisch besser, ist aber mathematisch noch nicht vollständig gelöst).
- Eine hervorragende ε -Anpassung garantiert noch nicht eine gute Parameterbestimmung sowie eine zufriedenstellende Extrapolierbarkeit. Zur Kontrolle sind daher vergleichende Betrachtungen der Güte der resultierenden $\dot{\varepsilon}$ -Funktion erforderlich, die die Identifikation gestörter bzw. nicht vom Modell beschriebener Versuchsabschnitte ermöglichen.
- Für die Berechnung von $\dot{\varepsilon}$ -Werten aus ε -Datensätzen wurde ein Verfahren gezeigt, dass für normalverteilte, autokorrelationsfreie Unsicherheiten der ε -Messung die Einhaltung einer vorgegebenen relativen Unsicherheit $u_{rel}^{max}[\dot{\varepsilon}_{calc}]$ erlaubt. In der Praxis unvermeidliche Autokorrelationen führen jedoch zu deutlich höheren relativen Unsicherheiten der berechneten $\dot{\varepsilon}$ -Werte, so dass die Vorgabe entsprechend kleinerer $u_{rel}^{max}[\dot{\varepsilon}_{calc}]$ erforderlich ist.
- Das Auswertungsschema für Kriechversuche fasst Abb. 1 zusammen.

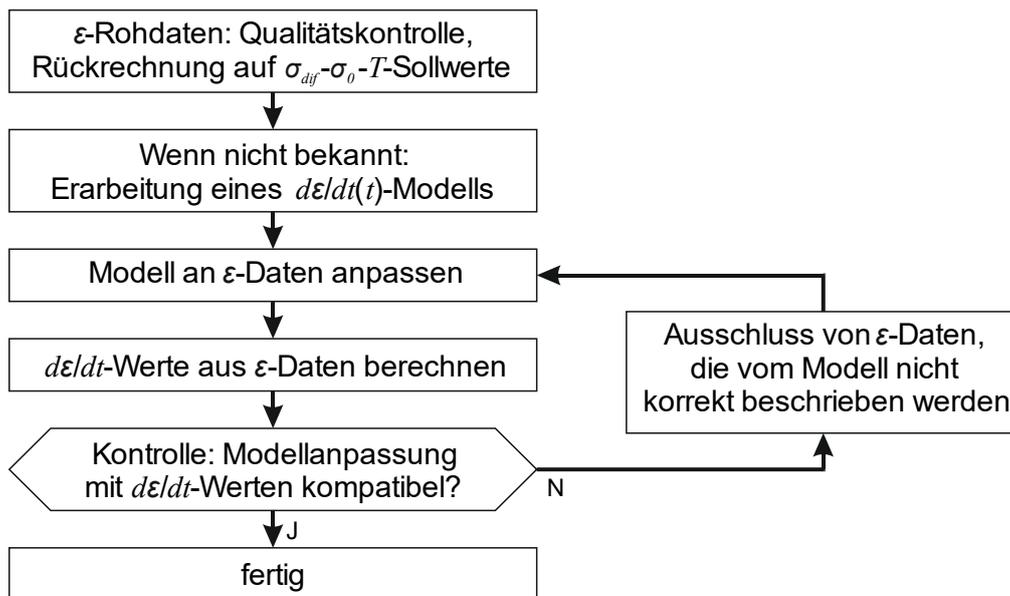


Abb. 1 Schema der Auswertung eines Kriechversuchs

Einleitung

Ausgehend von einem Messprogramm zur Untersuchung des Kriechverhaltens von M4-Salzbeton aus dem ERAM, insbesondere der Abhängigkeit des Kriechverhaltens von der deviatorischen Belastung (Differenzspannung) und der mittleren Normalspannung (Kugeltensor), werden erste Testergebnisse präsentiert. Der Schwerpunkt der Ausführungen soll dabei auf der Darstellung der dafür erforderlichen, verbesserten Methodik zur Auswertung von Kriechversuchen liegen.

Wenn aus Versuchen Aussagen über das Langzeitverhalten eines Materials abgeleitet werden sollen, so erfordert dies eine Auswertungsmethodik, die eine belastbare Beschreibung des zukünftigen Materialverhaltens ermöglicht, d. h. es müssen extrapolationsfähige Ergebnisse abgeleitet werden, die neben der Formulierung des zeitabhängigen Materialverhaltens auch die Quantifizierung der damit verbundenen Unsicherheiten erlauben. Da gängige Auswertungsansätze für Kriechversuche, z. B. das einfache Anpassen einer Tangente an den Endabschnitt der gemessenen Verformungskurve $\varepsilon(t)$, diese Anforderung nicht erfüllen, wurde eine neue Auswertungsmethodik für Kriechversuche entwickelt.

Ein ambitioniertes Untersuchungsprogramm

Beauftragt durch die BGE führt das gesteinsmechanische Labor der BGR umfangreiche Untersuchungen zum Langzeitverhalten von M4-Salzbeton aus dem ERAM durch. Ziel ist die Charakterisierung des Kriechverhaltens in Abhängigkeit von der Differenzspannung $\sigma_{dif} = \sigma_1 - \sigma_3$ und der mittleren Normalspannung ($\sigma_0 = \frac{(\sigma_1 + 2 \cdot \sigma_3)}{3}$). Untersucht wird 8 Jahre altes, also vollständig ausgehärtetes Material, das zum Teil aus Kernbohrungen aus dem Abbau 2n (09YER21/R002) und zum Teil aus Kontrollproben (in PVC-Rohre gegossen und untertägig im ERAM gelagert) stammt. Der Feuchtezustand des Materials zeigt mit einem mittleren Wassergehalt (Trocknungsverlust bei 105 °C) von 10.35 % bei einer Streuung von 0.25 % ein ziemlich einheitliches Bild, das auch von Trocknungsverlusten bei niedrigeren Temperaturen (60 bis 100 °C) bestätigt wird. Das vorgesehene Untersuchungsprogramm aus ein- und dreiaxialen Kriechversuchen sowie Relaxationsversuchen (Tab. 1) hat einen Gesamtumfang von 22.5 – 31.5 Prüfplatz-Jahren bzw. 14.5 – 20.8 Prüfmaschinen-Jahren.

Tab. 1 Das geplante Untersuchungsprogramm an M4-Salzbeton

Kugeltensor σ_0 [MPa]		Stützdruck $\sigma_2 = \sigma_3$ [MPa]	Deviator $\sigma_{dif} = \sigma_1 - \sigma_3$ [MPa]	Anzahl Proben		
				Kriechen (12-16 Mo- nate)	Kriechen (3-5 Monate)	Relaxation (3-5 Monate)
3	uniaxial	0	9	5	-	2
4	uniaxial	0	12	3	-	2
5	uniaxial	0	15	3	-	2
3	triaxial	2	3	1	1	2
4	triaxial	2.67	4	2	-	2
5	triaxial	3.33	5	1	1	1
4	triaxial	2	6	1	1	1
4.67	triaxial	2	8	-	-	2
4	isotrop	4	0	-	-	1
8	isotrop	8	0	2	-	-

Aufgrund umfangreicher Bauarbeiten in den BGR-Laboren konnten bisher erst wenige Versuche abgeschlossen werden. Die Nutzung für weitere Versuche nicht planbarer Zeiten ermöglichte es allerdings, die Laufzeit von 5 uniaxialen Kriechversuchen auf ca. 900 Tage zu verlängern und damit eine besonders günstige Datengrundlage für die Extrapolation des Langzeitverhaltens zu schaffen.

Was bedeutet “Einfluss von σ_{dif} und σ_0 auf das Kriechverhalten”?

Unter “Kriechen” wird im Weiteren zunächst rein phänomenologisch jedes zeitabhängige Verformungsverhalten unter konstanten Zustandsgrößen (d. h. konstantem σ_{dif} , σ_0 , T sowie ggf. weiteren Einflussgrößen wie z. B. Feuchte) zusammengefasst. Ob sich dabei auf der Grundlage von Messungen Verformungsbeiträge unterschiedlicher Deformationsmechanismen wie z. B. Kompaktionskriechen und deviatorisches Kriechen (ggf. primär, sekundär und tertiär) identifizieren lassen, lässt sich erst anhand konkreter Messreihen überprüfen.

Grundsätzlich ist das Kriechen unter konstanten Zustandsgrößen ein zeitabhängiger Prozess, d. h. er kann beschrieben werden durch

$$\dot{\epsilon}(t) = f(t; \sigma_{dif}, \sigma_0, T, \dots) \quad (1)$$

wobei die konstant gehaltenen Größen σ_{dif} , σ_0 und T als Parameter aufzufassen sind. Im Allgemeinen kann man davon ausgehen, dass die Art der funktionalen Zeitabhängigkeit nicht von den Werten der Zustandsgrößen σ_{dif} , σ_0 und T abhängt, so dass sich Gl.1 auch schreiben lässt als

$$\dot{\epsilon}(t) = f(t; p_1, \dots, p_m) \quad (2)$$

mit materialspezifischen, von den Werten der Zustandsgrößen abhängigen Parameterfunktionen $p_i(\sigma_{dif}, \sigma_0, T)$. Damit lässt sich der “Einfluss von σ_{dif} und σ_0 auf das Kriechverhalten” vollständig zurückführen auf die Zustandsgrößen-Abhängigkeit der Parameterfunktionen p_i .

Dafür muss aber zuerst die funktionale Abhängigkeit $\dot{\epsilon}(t) = f(t; p_1, \dots, p_m)$ bekannt sein. Solange keine physikalisch begründete, aus den Prozessmechanismen ableitbare Form dieser Abhängigkeit verfügbar ist (oder ggf. eine an vergleichbarem Material gefundene empirische Beschreibung), stellt die Herleitung einer empirisch begründeten Formulierung dieser Abhängigkeit einen ersten wesentlichen Schritt der Versuchsauswertung dar.

Ergebnisse eines triaxialen Kriechversuchs und Etablierung einer empirisch begründeten Formulierung für $\dot{\epsilon}(t) = f(t; p_1, \dots, p_m)$

Den Verlauf des bislang 190 Tage laufenden triaxialen Kriechversuchs D1-21048 mit den Sollbedingungen $\sigma_{dif} = 3 \text{ MPa}$, $\sigma_0 = 3 \text{ MPa}$ und $T = 30 \text{ }^\circ\text{C}$ zeigt Abb.2. Versuchsphasen, in denen die Sollbedingungen nicht eingehalten sind (also während Versuchsstörungen sowie vor Einstellung der Sollbedingungen) sind grau hinterlegt – Daten aus diesen Zeiträumen können natürlich nicht für die Versuchsauswertung verwendet werden. Bei $169 \text{ d} < t < 171.5 \text{ d}$ kam es zu einer Störung der Temperaturregelung, bei $t \approx 72 \text{ d}$ zu einer ungeklärten Störung, die einen Offset der Verformungsmessung verursachte.

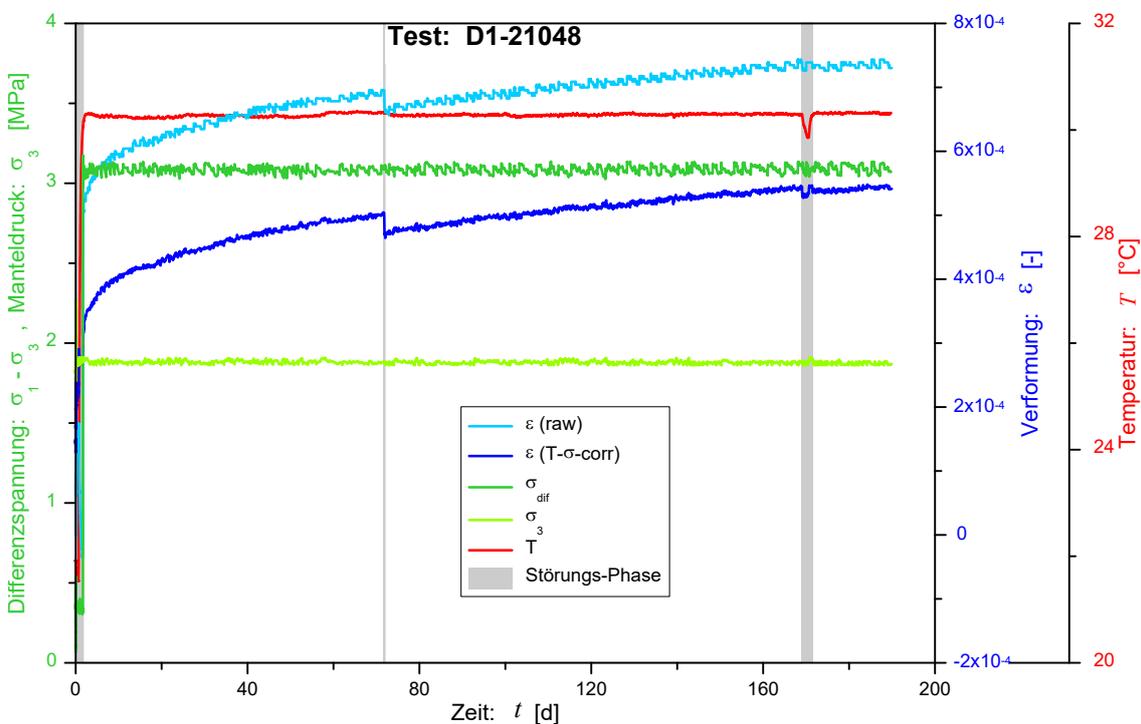


Abb. 2 Verlauf des triaxialen Kriechversuchs D1-21048

Da die Zustandsgrößen σ_{dif} , σ_0 und T als geregelte Größen immer kleinen Schwankungen unterliegen, die wiederum zu elastischen bzw. thermischen Deformationen der Probe führen, empfiehlt es sich, diese Deformationsanteile heraus zu korrigieren und den Probenzustand auf die Sollwerte der Zustandsgrößen zurückzurechnen:

$$\varepsilon_{corr} = \varepsilon_{raw} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma_{dif}} \cdot (\sigma_{dif} - \sigma_{dif.soll}) - \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma_0} \cdot (\sigma_0 - \sigma_{0.soll}) - \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \cdot (T - T_{soll}) \quad (3)$$

Die dafür benötigten Materialkennwerte

$$\begin{aligned} \text{Kehrwert des E-Modul:} & \quad \frac{1}{E} = - \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma_{dif}} \right|_{\sigma_0, T} \\ \text{Kompressibilität:} & \quad \kappa = \frac{1}{K} = -3 \cdot \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma_0} \right|_{\sigma_{dif}, T} \\ \text{therm. Längenausdehnungskoeff.:} & \quad \varepsilon = \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right|_{\sigma_{dif}, \sigma_0} \end{aligned} \quad (4)$$

werden zweckmäßigerweise durch entsprechende Variationen der Zustandsgrößen nach Beendigung der Kriechphase bestimmt. Die Reduktion der gemessenen Verformungen auf die Sollbedingungen verringert i. A. das Rauschen der $\varepsilon(t)$ -Daten signifikant (vgl. Abb. 2) und reduziert insbesondere die Autokorrelation des Rauschens, was die Qualität der aus $\varepsilon(t)$ -Daten berechneten Verformungsraten $\dot{\varepsilon}(t)$ erheblich verbessert.

Eine Schwierigkeit bei der Herleitung einer empirisch begründeten Formulierung für die Zeitabhängigkeit $\dot{\varepsilon}(t) = f(t; p_1, \dots, p_m)$ des transienten Kriechens besteht darin, dass sich aus Darstellungen des $\varepsilon(t)$ -Verlaufs wie in Abb. 2 meist keine klaren Hinweise auf die Art der funktionalen Zeitabhängigkeit gewinnen lassen. Dies gilt auch, wenn man die Achsen anders skaliert (z. B. logarithmiert).

Bessere Aussichten bietet hier die Betrachtung des Verlaufs der Verformungsrate $\dot{\varepsilon}(t)$. Deren Berechnung stellt allerdings ein nicht-triviales Problem dar, das in Kap. „Berechnung von Verformungsraten $\dot{\varepsilon}$ aus gemessenen ε -Werten“ diskutiert wird. Zunächst gibt auch eine halb- oder doppelt logarithmische Darstellung von $\dot{\varepsilon}(t)$ oft noch keinen geeigneten Hinweis auf die Natur des $\dot{\varepsilon}(t)$ -Zusammenhangs (Abb. 3).

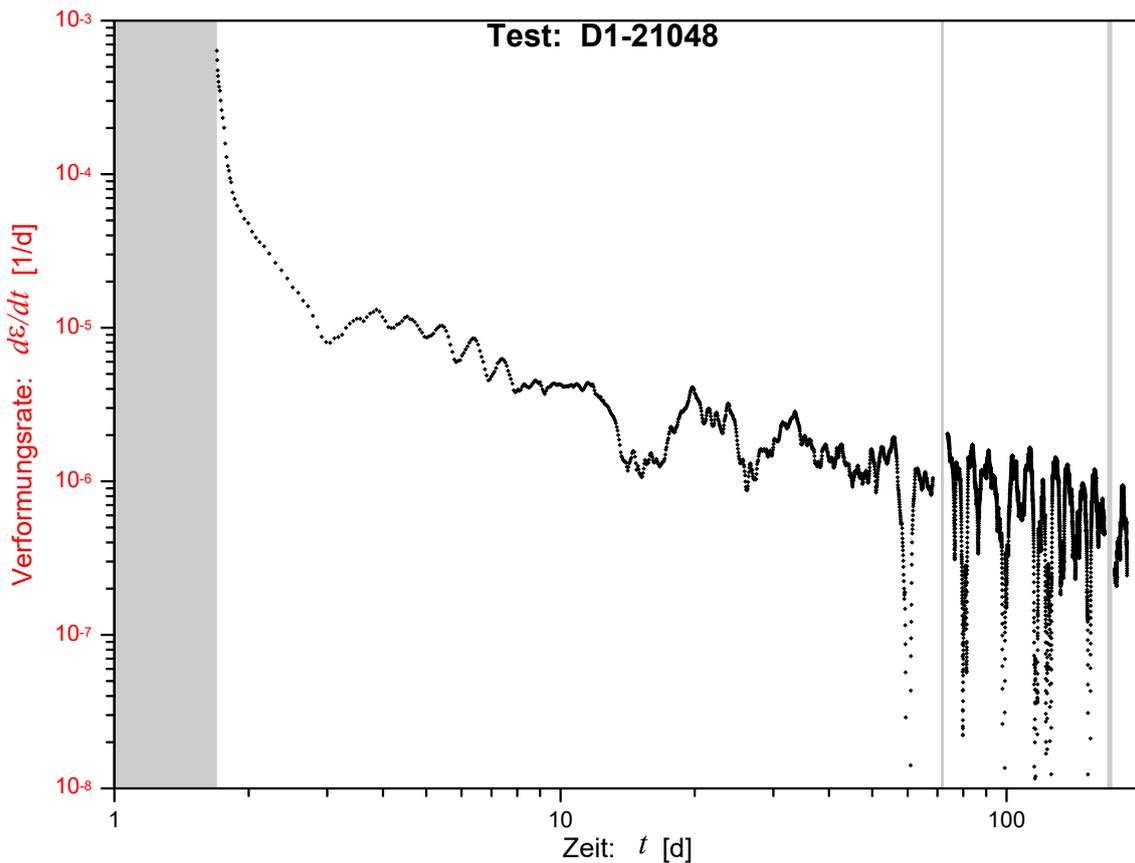


Abb. 3 Verlauf der Verformungsrate im triaxialen Kriechversuch D1-21048 in doppelt logarithmischer Darstellung

Bei Logarithmierung der Abszisse ist aber zu bedenken, dass die Wahl des Nullpunktes der Zeitachse willkürlich ist, die Kurvenform einer Messkurve in einer Darstellung mit logarithmierter Abszisse aber vollkommen verändern kann. Das Durchspielen unterschiedlicher Festlegungen des Nullpunktes der Zeitachse kann daher bei der Suche nach dem funktionalen Zusammenhang $\dot{\varepsilon}(t) = f(t; p_1, \dots, p_m)$ sehr nützlich sein. Dies bedeutet selbstverständlich nicht eine völlig beliebige Nullpunktwahl, vielmehr ist der gewählte Nullpunkt im Sinne eines Prozess-Nullpunktes zu verstehen und ist daher in einer plausiblen Nähe zum Beginn des untersuchten Prozesses, also nahe am Zeitpunkt der Aufbringung der deviatorischen Belastung zu suchen. Im Fall des Versuchs D1-21048 zeigt sich für die Zeittransformation $t \rightarrow t - 1.687 \text{ d}$ ein linearer Zusammenhang zwischen $\ln(t)$ und $\ln(\dot{\varepsilon})$ (Abb. 4), d. h. $\dot{\varepsilon}(t) = f(t; p_1, \dots, p_m)$ besitzt die Form einer Potenzfunktion (Power-Law). Unter Einbeziehung eines etwaigen stationären Kriechterms lässt sich dies schreiben als

$$\dot{\varepsilon}(t) = \dot{\varepsilon}_{stat} + a \cdot \left(\frac{t-t_0}{t_{dim}} \right)^b$$

$$\Rightarrow \varepsilon(t) = \dot{\varepsilon}_{stat} \cdot (t-t_0) + \frac{a}{b+1} \cdot t_{dim} \cdot \left(\frac{t-t_0}{t_{dim}} \right)^{b+1} + \varepsilon_0 \quad (5)$$

mit

t_{dim} = Dimensionsfaktor (hier : $t_{dim} = 1d$)

Material - Parameter :

a = multiplikativer Parameter

b = Exponent

$\dot{\varepsilon}_{stat}$ = stationäre Kriechrate

versuchsbedingte Parameter :

t_0 = Referenzzeitpunkt ("Prozess-Nullpunkt")

ε_0 = Integrationskonstante

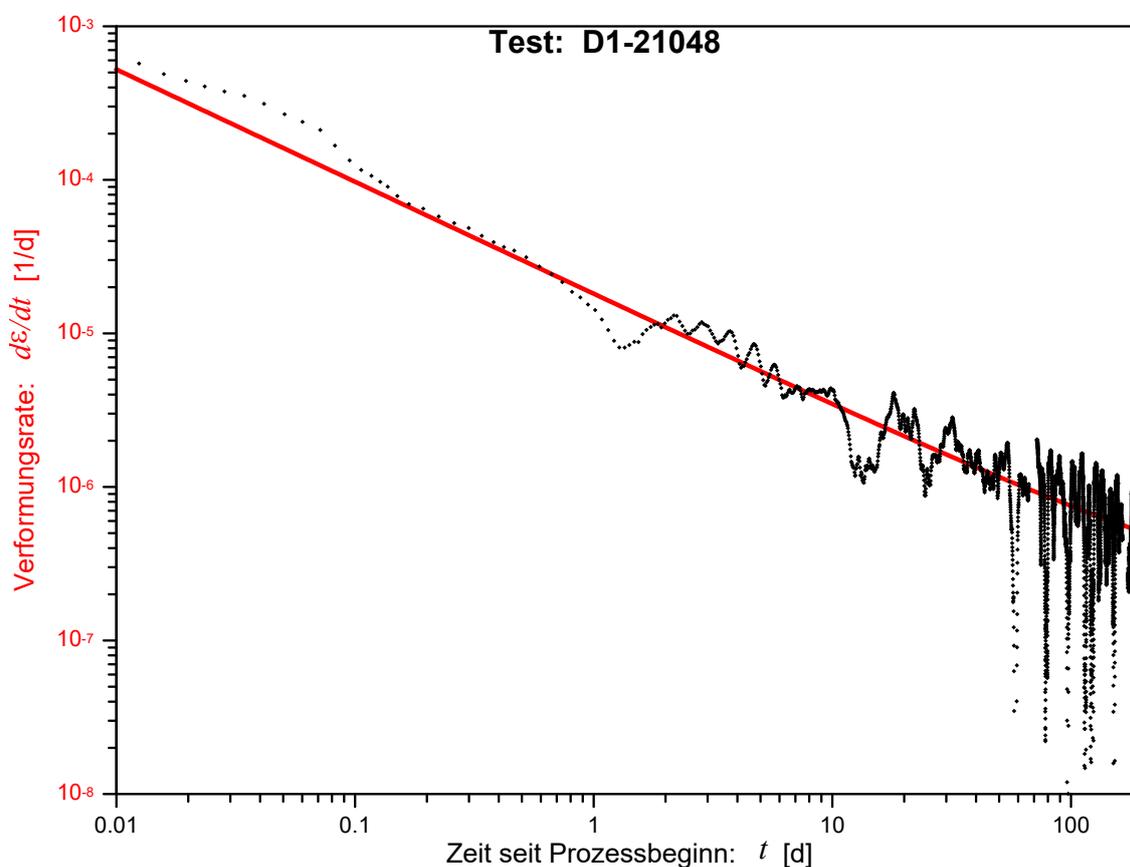


Abb. 4 Verlauf der Verformungsrate im triaxialen Kriechversuch D1-21048 in doppelt logarithmischer Darstellung mit einer Nullpunktverschiebung um 1.687 d

Schon aufgrund der langen Versuchsdauer sind Störungen ein häufiges Phänomen in Kriechversuchen. Es ist daher wichtig, in eine Auswertungsmethodik Instrumentarien zu integrieren, die eine sachgerechte, d. h. den mit Versuchsstörungen verbundenen physikalischen Auswirkungen Rechnung tragende Auswertung ermöglichen. Dies ist natürlich nur dann möglich, wenn die Versuchsstörungen nicht zu irreversiblen Probenveränderungen führen, die das Materialverhalten signifikant verändern. Setzt man derart "unschädliche" Folgen von Versuchsstörungen voraus, so verbleiben nach einer Störung (und ggf. einer sich anschließenden Phase allmählich abklingender Störungsfolgen) zwei mögliche dauerhafte Folgen einer Versuchsstörung:

- Ein Offset der Verformungskurve (z. B. als plastischer Verformungsanteil nach einer kurzzeitig überhöhten isotropen oder deviatorischen Belastung)
- Eine Verschiebung des Prozess-Nullpunktes (z. B. würde in einer Störungsphase mit völlig lastfreien Bedingungen der Kriechprozess weitestgehend zu Stillstand kommen, so dass der Prozess-Nullpunkt danach ungefähr um die Dauer der Störungsphase verschoben wäre)

Wird der Versuchsablauf also durch Störungsphasen in np voneinander getrennte störungsfreie Zeitabschnitte $\{[t_{a_k}, t_{e_k}], k = 1, \dots, np\}$ aufgeteilt, dann lassen sich die genannten Effekte leicht in die Beschreibung des Potenzgesetzes für $\dot{\varepsilon}(t)$ integrieren, indem für jede störungsfreie Phase ein eigener Wert $t_{0,k}$ für den Prozess-Nullpunkt und eine eigene Integrationskonstante $\varepsilon_{0,k}$ angenommen wird:

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}(t) &= \dot{\varepsilon}_{stat} + a \cdot \sum_{k=1}^{np} \Psi_k(t) \cdot \left(\frac{t - t_{0,k}}{t_{dim}} \right)^b \\ \Rightarrow \varepsilon(t) &= \dot{\varepsilon}_{stat} \cdot (t - t_{0,1}) + \sum_{k=1}^{np} \Psi_k(t) \cdot \left(\frac{a}{b+1} \cdot t_{dim} \cdot \left(\frac{t - t_{0,k}}{t_{dim}} \right)^{b+1} + \varepsilon_{0,k} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

Dabei selektiert die Funktion $\Psi_k(t)$ jeweils nur den k -ten störungsfreien Zeitabschnitt:

$$\begin{aligned} \Psi_k(t) &:= \theta(t - t_{a_k}) \cdot \theta(t_e_k - t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < t_{a_k} \vee t > t_{e_k} \\ 1 & \text{für } t_{a_k} \leq t \leq t_{e_k} \end{cases} \\ \text{mit Heaviside-Funktion: } \theta(x) &= \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ 1 & \text{für } x \geq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (7)$$

Praktisch kann die Bestimmung der $t_{0,k}$ mittels Kurvenanpassung (insbes. für späte störungsfreie Zeitabschnitte) ein mathematisch schlecht konditioniertes Problem darstellen und zu unphysikalischen Ergebnissen führen. Wenn also absehbar ist, dass eine Versuchsstörung keine relevante Verschiebung des Prozess-Nullpunktes verursacht, ist es vorzuziehen, für die nachfolgende ungestörte Phase auf den Parameter $t_{0,k}$ zu verzichten. Alle im Weiteren gezeigten Ergebnisse basieren daher auf einer vereinfachten Form von Gl. 6:

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}(t) &= \dot{\varepsilon}_{stat} + a \cdot \sum_{k=1}^{np} \Psi_k(t) \cdot \left(\frac{t-t_0}{t_{dim}} \right)^b \\ \Rightarrow \varepsilon(t) &= \dot{\varepsilon}_{stat} \cdot (t-t_0) + \sum_{k=1}^{np} \Psi_k(t) \cdot \left(\frac{a}{b+1} \cdot t_{dim} \cdot \left(\frac{t-t_0}{t_{dim}} \right)^{b+1} + \varepsilon_{0,k} \right) \end{aligned} \quad (8)$$

Die Bestimmung der Parameter eines empirischen Prozessmodells wie Gl. 8 durch Anpassung an den Messdatensatz ist mit den etablierten Methoden nichtlinearer Kurvenanpassung (z. B. Levenberg-Marquardt-Algorithmus) möglich. Entscheidend für die Möglichkeit einer Quantifizierung der Prognoseunsicherheit ist dabei, dass eine derartige Kurvenanpassung nicht nur Werte für die Modellparameter liefert, sondern auch statistisch basierte Angaben zur Unsicherheit dieser Parameter (asymptotische Standardfehler) sowie zu den Kovarianzen der Parameter.

Ob die Parameterbestimmung besser durch Anpassung der Verformungen $\varepsilon(t)$ oder der Verformungsraten $\dot{\varepsilon}(t)$ erfolgt, wird in Kap. "Parameterbestimmung des empirischen Modells" diskutiert. Hier wird zunächst in Tab. 2 und Abb. 5 das Ergebnis einer Anpassung der Verformungen $\varepsilon(t)$ exemplarisch für den Versuch D1-21048 gezeigt. Das Fitten liefert für $\varepsilon(t)$ eine sehr gute Anpassung ($R^2 = 0.9958$, $RMSE = 2.41 \cdot 10^{-6}$) mit so geringen Unsicherheiten der Parameter, dass die Konfidenzintervalle für $\dot{\varepsilon}(t)$ so schmal werden, dass sie in Abb. 5 nicht sichtbar sind. Sehr viel wichtiger ist aber (vgl. Kap. "ε-Fits"), dass auch die aus dem $\varepsilon(t)$ -Fit resultierende $\dot{\varepsilon}(t)$ -Kurve in guter Übereinstimmung mit den "gemessenen" Verformungsraten (eigentlich sind sie nicht gemessen, sondern aus Verformungsmessdaten berechnet) steht und die relativen Abweichungen $\dot{\varepsilon}_{obs}/\dot{\varepsilon}_{fit} - 1$ über die gesamte Messdauer nur statistische Schwankungen um den Wert Null aufweisen (Abb. 5).

Tab. 2 Ergebnis der Anpassung der gemessenen Verformungen im triaxialen Kriechversuch D1-21048 mit einem Power-Law-Modell

Anpassung an $\varepsilon(t)$ -Daten		Parameter-Wert	asympt. Stdd.-Fehler
n	40392		
R^2	0.9958		
$RMSE$	$2.41 \cdot 10^{-6}$		
ta_1, te_1	1.6873 d	71.81 d	
ta_2, te_2	71.85 d	169.065 d	
ta_3, te_3	171.432 d	190 d	
		a	$1.7995 \cdot 10^{-5} \text{ d}^{-1}$
		b	-0.7317
		$\dot{\varepsilon}_{stat}$	$1.344 \cdot 10^{-7} \text{ d}^{-1}$
		t_0	1.68730 d
		$\varepsilon_{0.1}$	$2.784 \cdot 10^{-5}$
		$\varepsilon_{0.2}$	$2.493 \cdot 10^{-4}$
		$\varepsilon_{0.3}$	$2.405 \cdot 10^{-4}$

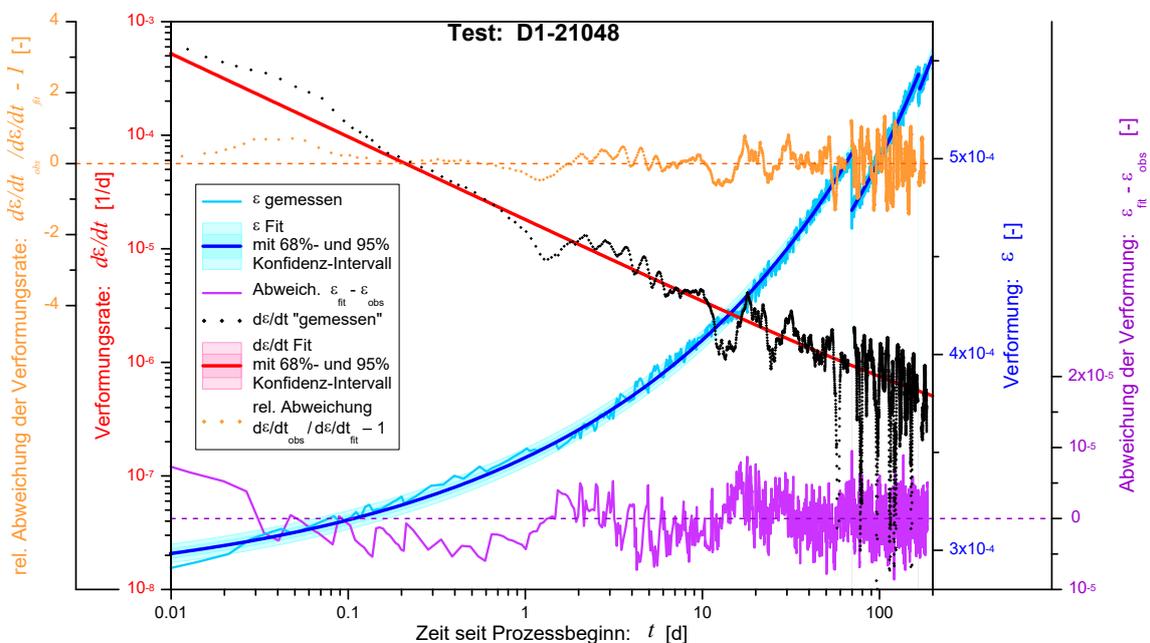


Abb. 5 Ergebnis der Anpassung der gemessenen Verformungen im triaxialen Kriechversuch D1-21048 mit einem Power-Law-Modell

Unter Beachtung der Regeln der Fehlerfortpflanzung können dann auch für das Langzeitverhalten der Probe, d. h. für die Extrapolation in die Zukunft, Verlauf und Unsicherheit der $\varepsilon(t)$ - und $\dot{\varepsilon}(t)$ -Verläufe berechnet werden. Selbst bei Prognosen auf über 1000 Jahre sind die statistischen Prognoseunsicherheiten noch verschwindend gering (Abb. 6). Außerdem zeigt sich, dass nach einigen 1000 d mit der Dominanz des stationären Kriechterms zu rechnen ist.

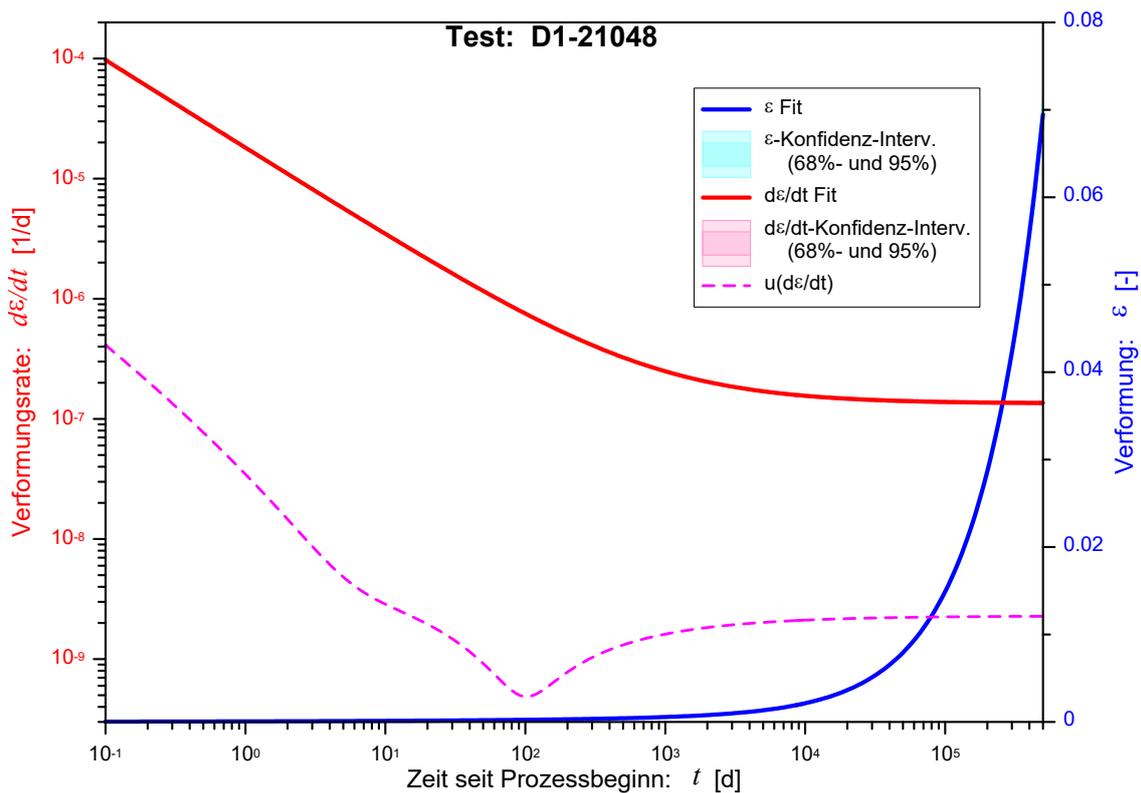


Abb. 6 Extrapolation der Anpassung der gemessenen Verformungen im triaxialen Kriechversuch D1-21048 bis ca. 1370 Jahre

Die Frage, ob es sich bei dem beobachteten zeitabhängigen Verformungsverhalten um Kompaktionskriechen oder um volumentreues primäres Kriechen (“Basiskriechen”) oder eine Überlagerung beider Mechanismen handelt, lässt sich anhand der ermittelten Parameterwerte klar entscheiden: Da Kompaktionskriechen spätestens beim Erreichen einer Porosität von Null nach einem endlichen Verformungsbetrag ε_{komp}^{max} zu Stillstand kommt, muss unter Verwendung von Gl. 6 immer gelten

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (\varepsilon_{komp}(t)) = \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\dot{\varepsilon}_{stat} \cdot (t - t_0) + \frac{a}{b+1} \cdot t_{dim} \cdot \left(\frac{t - t_0}{t_{dim}} \right)^{b+1} + \varepsilon_0 \right) \leq \varepsilon_{komp}^{max}$$

$$\Rightarrow \dot{\varepsilon}_{stat} = 0 \quad \wedge \quad b < -1 \quad (9)$$

Der ermittelte Wert von $b = -0.732 \pm 0.001$ ist also mit Kompaktionskriechen nicht kompatibel und somit klar einem primären Kriechen zuzuordnen. Da selbst ganz am Anfang des Versuchs keine Hinweise auf eine schneller abklingende Verformungskomponente zu erkennen sind, ist ein möglicher Beitrag von Kompaktionsprozessen in diesem Versuch vernachlässigbar gering.

Ergebnisse uniaxialer Kriechversuche

Aufgrund zu erwartender Baumaßnahmen im gesteinsmechanischen Labor der BGR konnten bislang nur 5 uniaxiale Kriechversuche mit $\sigma_{dif} = 12 \text{ MPa}$ durchgeführt werden, diese aber auf eine Laufzeit von bislang ca. 900 Tagen verlängert werden. Auch diese Versuche waren von einigen Störungen betroffen, insbesondere einer Störung der Spannungsregelung (101 – 110 d) und zwei längerfristigen Ausfällen der Heizsysteme (280 – 338 d und 391 – 427 d). Die Daten zeigen zudem deutlich (Abb. 7), dass das Material nach den Temperaturstörungen noch eine längere “Erholungszeit” braucht, bevor es wieder auf den ungestörten Prozesspfad zurückkehrt; effektiv führten die beiden Heizungsausfälle damit dazu, dass die Daten für den Zeitraum 280 – 480 d nicht nutzbar sind.

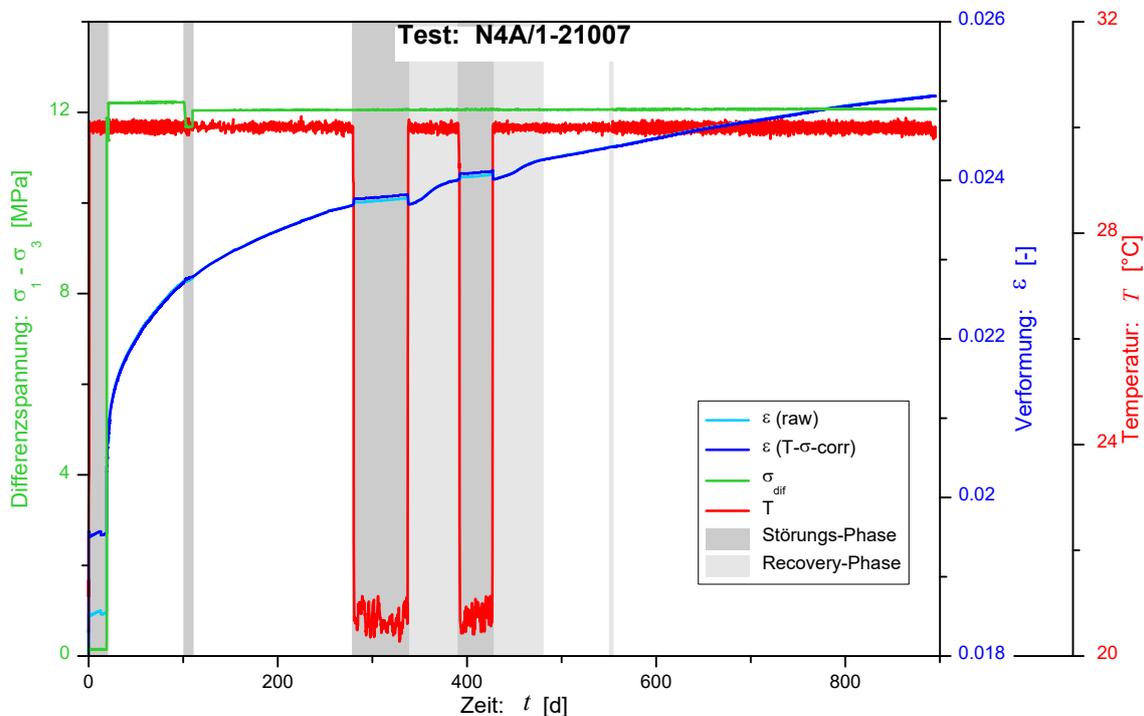


Abb. 7 Verlauf des uniaxialen Kriechversuchs N4A/1-21007

Abb. 8 und Tab. 3 zeigen exemplarisch die Ergebnisse der Anpassung eines Power-Law-Modells an die $\epsilon(t)$ -Messdaten des Versuchs N4A/1-21007. Wie beim triaxialen Test zeigt sich auch hier ein von primärem Kriechen dominiertes Verhalten ($b = -0.7616 \pm 0.0004$), wobei ein anfänglicher Beitrag eines schneller abklingenden Prozesses aber nicht auszuschließen ist (vgl. Abb. 8).

Tab. 3 Ergebnis der Anpassung der gemessenen Verformungen im uniaxialen Kriechversuch N4A/1-21007 mit einem Power-Law-Modell

Anpassung an $\varepsilon(t)$ -Daten		Parameter-Wert	asympt. Std.-Fehler	
n	456150	a	$3.0396 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$	$0.0018 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$
R^2	0.9999	b	-0.7616	0.0004
$RMSE$	$1.18 \cdot 10^{-5}$	$\dot{\varepsilon}_{stat}$	$0.0 \cdot 10^{-9} \text{ d}^{-1}$	$2.2 \cdot 10^{-9} \text{ d}^{-1}$
ta_1, te_1	21.0597 d	t_0	17.899 d	0.007 d
ta_2, te_2	109.9097 d	$\varepsilon_{0.1}$	$1.9325 \cdot 10^{-2}$	$0.0005 \cdot 10^{-2}$
ta_3, te_3	480 d	$\varepsilon_{0.2}$	$1.9303 \cdot 10^{-2}$	$0.0005 \cdot 10^{-2}$
ta_4, te_4	554.1326 d	$\varepsilon_{0.3}$	$1.9181 \cdot 10^{-2}$	$0.0005 \cdot 10^{-2}$
		$\varepsilon_{0.4}$	$1.9181 \cdot 10^{-2}$	$0.0005 \cdot 10^{-2}$

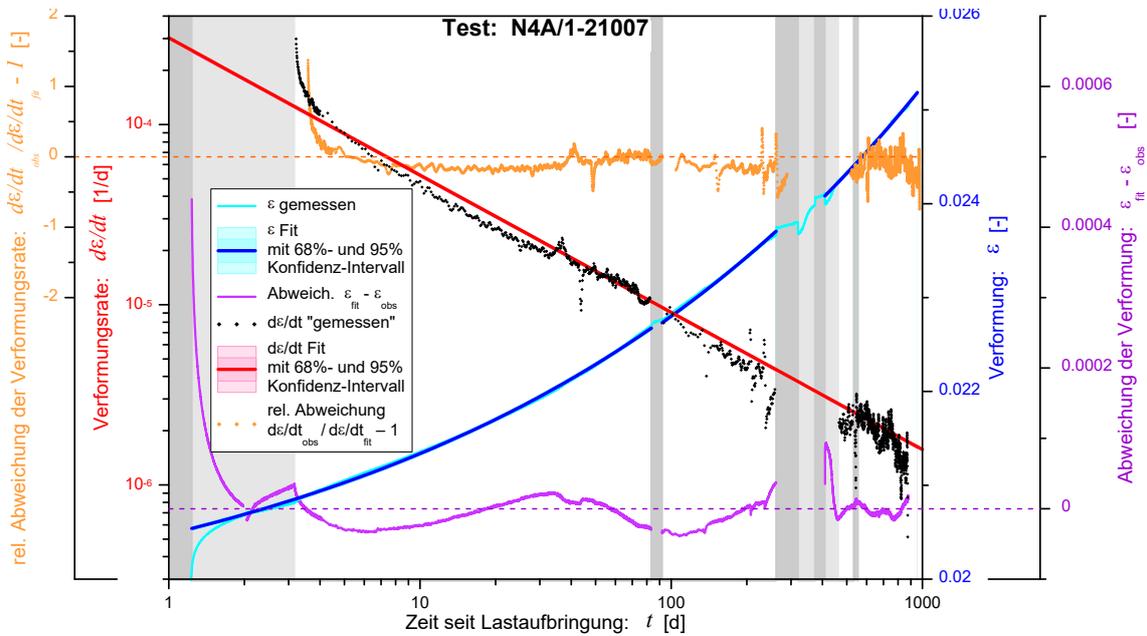


Abb. 8 Ergebnis der Anpassung der gemessenen Verformungen im uniaxialen Kriechversuch N4A/1-21007 mit einem Power-Law-Modell

Auch hier zeigen sich bei sehr guter Anpassung ($R^2 = 0.9999$, $RMSE = 1.39 \cdot 10^{-10}$) extrem geringe statistischen Prognoseunsicherheiten. Dies darf aber unter zwei ganz unterschiedlichen Gesichtspunkten nicht missverstanden werden:

- Eine statistisch fundierte hohe Präzision von Ergebnissen ist keineswegs gleichbedeutend mit der Richtigkeit dieser Ergebnisse (vgl. dazu Kap. “ ϵ -Fits”).
- Die sehr präzisen Ergebnisse repräsentieren nicht unser Wissen über das Material “Salzbeton M4”, sondern lediglich unser Wissen über die eine untersuchte Probe.

Aussagen über das Material sind erst auf der Grundlage hinreichend vieler Parallel-Versuche möglich (hier liegen 5 Parallel-Versuche vor). Diese erlauben die Bestimmung von mittleren Parameterwerten sowie die Berechnung einer Modellprognose und ihrer heterogenitäts-bedingten Unsicherheit für das Material. Da zwischen den Parametern i. A. relevante Kovarianzen bestehen, ist es hier (ebenso wie bei der Berechnung der Unsicherheiten einzelner Anpassungen an Versuchsdaten) wichtig, die Fehlerfortpflanzung nicht mit der oft verwendeten “naiven” Fehlerfortpflanzung mittels Diagonalform der Gauss’schen Fehlerfortpflanzungsformel

$$u[f(p_1, \dots, p_n)] = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \cdot u[p_i] \right)^2} \quad (10)$$

zu berechnen, sondern unter Berücksichtigung der Kovarianzen der Parameter mit der vollständigen Form der Gauss’schen Formel

$$u[f(p_1, \dots, p_n)] = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial p_j} \cdot C_{ij}}$$

mit $(C_{ij}) = \text{Kovarianzmatrix}$

$$u[p_i] = \sqrt{C_{ii}} \quad (11)$$

Die Auswertung der 5 uniaxialen Kriechversuche mit $\sigma_{dif} = 12 \text{ MPa}$ ($\Rightarrow \sigma_0 = 4 \text{ MPa}$) zeigt, dass die aus der Heterogenität des Materials resultierende Streuung der Materialparameter um 2 Größenordnungen über der Bestimmungsgenauigkeit für eine Einzelprobe liegt (Tab. 4). Die Streuung der Kriecheigenschaften und die damit verbundene Prognoseunsicherheit zeigt sich besonders in der Extrapolation auf längere Zeiträume (Abb. 9).

Tab. 4 Parameterbestimmung an 5 uniaxialen Kriechversuchen mit $\sigma_{dif} = 12 \text{ MPa}$

	N4A/1-21007	N4A/2-21008	N4A/3-21006	N4A/4-21010	N4A/5-21005	Mittelwert
$a \text{ [d}^{-1}\text{]}$	$3.0396 \cdot 10^{-4}$	$3.162 \cdot 10^{-4}$	$2.5787 \cdot 10^{-4}$	$2.1546 \cdot 10^{-4}$	$3.317 \cdot 10^{-4}$	$2.81 \cdot 10^{-4}$
$b \text{ [-]}$	-0.7616	-0.7900	-0.7498	-0.7235	-0.7847	-0.762
$\dot{\epsilon}_{stat} \text{ [d}^{-1}\text{]}$	$2.2 \cdot 10^{-14}$	$2.182 \cdot 10^{-7}$	$3.6 \cdot 10^{-14}$	$7.1 \cdot 10^{-11}$	$7.69 \cdot 10^{-8}$	$6 \cdot 10^{-8}$
$u[a] \text{ [d}^{-1}\text{]}$	$0.0023 \cdot 10^{-4}$	$0.003 \cdot 10^{-4}$	$0.0016 \cdot 10^{-4}$	$0.0009 \cdot 10^{-4}$	$0.003 \cdot 10^{-4}$	$0.21 \cdot 10^{-4}$
$u[b] \text{ [-]}$	0.0004	0.0004	0.0003	0.0003	0.0004	0.012
$u[\dot{\epsilon}_{stat}] \text{ [d}^{-1}\text{]}$	$2.2 \cdot 10^{-9}$	$2.0 \cdot 10^{-9}$	$1.7 \cdot 10^{-9}$	$1.9 \cdot 10^{-9}$	$2.4 \cdot 10^{-9}$	$4 \cdot 10^{-9}$

Kovarianzmatrix			
	a	b	$\dot{\epsilon}_{stat}$
a	$2.270 \cdot 10^{-9} \text{ d}^{-2}$	$-1.234 \cdot 10^{-6} \text{ d}^{-1}$	$2.593 \cdot 10^{-12} \text{ d}^{-2}$
b	$-1.234 \cdot 10^{-6} \text{ d}^{-1}$	$7.342 \cdot 10^{-4}$	$-1.971 \cdot 10^{-9} \text{ d}^{-1}$
$\dot{\epsilon}_{stat}$	$2.593 \cdot 10^{-12} \text{ d}^{-2}$	$-1.971 \cdot 10^{-9} \text{ d}^{-1}$	$9.023 \cdot 10^{-15} \text{ d}^{-2}$

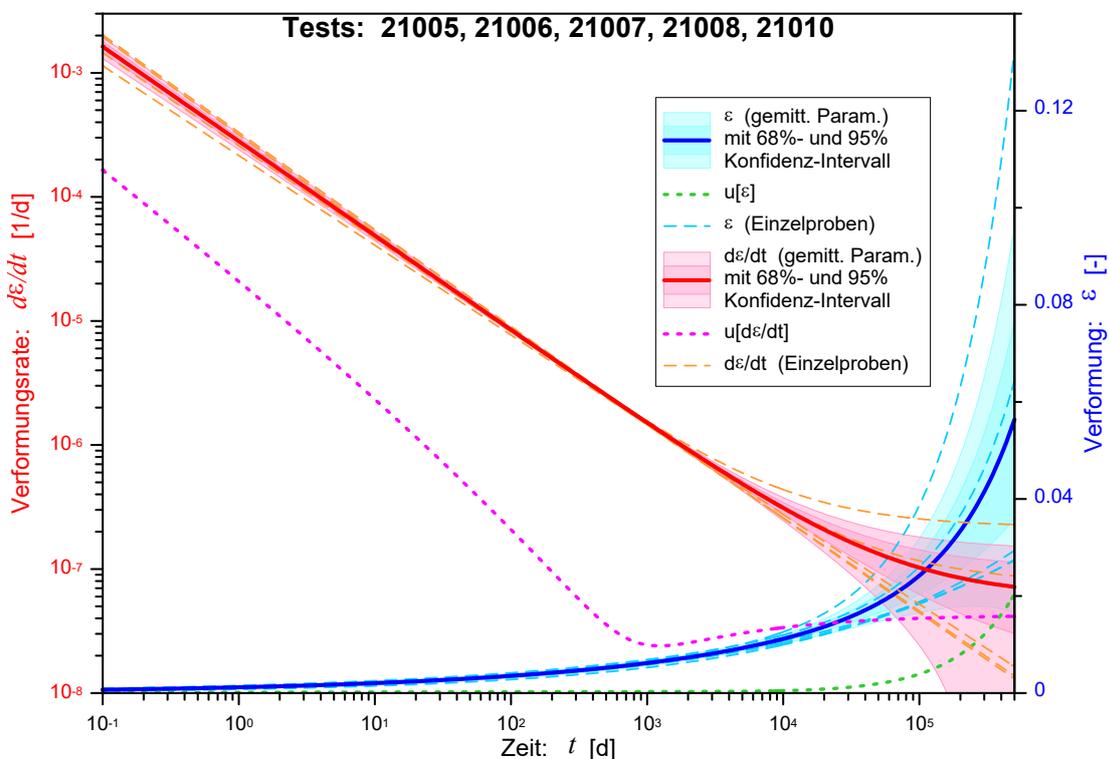


Abb. 9 Extrapolation des Kriechverhaltens der Einzelproben und für gemittelte Materialparameter

Parameterbestimmung des empirischen Modells: Anpassung von $\varepsilon(t)$ oder $\dot{\varepsilon}(t)$?

Bei Parameterbestimmungen durch Anpassung von Modellen an Messdaten ist immer zu bedenken, dass alle Daten, deren Werte durch das Modell nicht optimal beschrieben werden, zu einer Verfälschung der ermittelten Parameterwerte führen. Dabei ist es egal, ob die Ursache in Störungen des Versuchsablaufs bzw. der Datenerfassung liegt (korrupte Daten), oder ob die Daten durch Prozesse beeinflusst sind, die im verwendeten Modellansatz nicht abgebildet werden (unvollständiges Modell). Eine gründliche Eliminierung derartiger Datenbereiche vor Anpassung eines Modells ist daher unverzichtbar.

Oft ist es allerdings nicht einfach, solche Daten zu erkennen, insbesondere im Fall einer unvollständigen Modellformulierung. Gerade in der Anfangsphase von Kriechversuchen ist mit Einflüssen von schnellen abklingenden Prozessen zu rechnen, die z. B. in einem einfachen Power-Law-Modell nicht berücksichtigt sind. Grundsätzlich wäre dann auch die Verwendung eines erweiterten Modells möglich; liegt der Fokus des Interesses aber auf dem Langzeitverhalten des untersuchten Materials, dann ist der Ausschluss der Daten aus der Anfangsphase die bessere Option, da jede Modellerweiterung nicht nur die Zahl der Parameter und damit den Rechenaufwand erhöht, sondern vor allem auch die Identifizierbarkeit der Parameter erschwert oder sogar aufgrund schlechterer Kondition des Anpassungsproblems unmöglich machen kann.

Physikalisch sind die differenzierte Form

$$\dot{\varepsilon}(t) = \dot{\varepsilon}_{stat} + a \cdot \left(\frac{t-t_0}{t_{dim}} \right)^b \quad (12)$$

und die integrierte Modellformulierung

$$\varepsilon(t) = \dot{\varepsilon}_{stat} \cdot (t-t_0) + \frac{a}{b+1} \cdot t_{dim} \cdot \left(\frac{t-t_0}{t_{dim}} \right)^{b+1} + \varepsilon_0 \quad (13)$$

äquivalent. Für die Parameterbestimmung durch Anpassung des Modells an Daten gibt es dagegen grundlegende Unterschiede.

Bei Anpassung des Modells an die gemessenen Verformungen ε gilt:

- + Die Anpassung ist als nicht-lineare Regression mathematisch einfach. Die zu minimierende Zielfunktion ist $Z(\{p_j\}) = \sum_{\text{Messpunkte}} (\varepsilon_{\text{fit}}(t_i; \{p_j\}) - \varepsilon_{\text{obs}}(t_i))^2$.
- + Die Verformungswerte $\varepsilon(t_i)$ liegen direkt als Messdaten vor.
- Der $\varepsilon(t)$ -Verlauf gibt wenig Hinweise für die Wahl eines geeigneten Modells (z. B. auch nicht durch Logarithmierung der Ordinate).
- Es gibt keine Möglichkeit einer Anpassung, die die relativen Fehler der Verformungsraten $\dot{\varepsilon}$ minimiert.
- Abweichungen der Verformung werden zu allen Zeiten gleich gewichtet. Die für die Bestimmung des Langzeitverhaltens besonders wichtigen späten Versuchsabschnitte mit sehr geringen Verformungsraten werden somit nicht genauer angepasst als die frühen Phasen, deren um Größenordnungen höheren Verformungsbeiträge daher die Parameterbestimmung übermäßig stark beeinflussen.
- Daraus resultiert eine Anfälligkeit für mangelhafte Parameterbestimmungen durch (häufig vorkommendes) vom Modell abweichendes Probenverhalten in frühen Testphasen, ohne dass dies leicht erkennbar wäre.

Bei Anpassung des Modells an die Verformungsraten $\dot{\varepsilon}$ bei Minimierung der relativen Fehler $1 - \dot{\varepsilon}_{obs} / \dot{\varepsilon}_{fit}$ gilt:

- Die Anpassung ist eine mathematisch schwierigere Aufgabe mit 2 Möglichkeiten:

- 1) “Logarithmische” Minimierung mit Zielfunktion

$$Z(\{p_j\}) = \sum_{\text{Messpunkte}} \ln \left(\dot{\varepsilon}_{fit}(t_i; \{p_j\}) / \dot{\varepsilon}_{obs}(t_i) \right)^2.$$

Dies ist eine gewöhnliche nicht-lineare Regression, minimiert aber nur für kleine Streuungen der Messdaten asymptotisch den relativen Fehler von $\dot{\varepsilon}$. Bei größerer Streuung kommt es dagegen zur systematischen Unterschätzung des $\dot{\varepsilon}(t)$ -Verlaufs, und beim Auftreten von negativen $\dot{\varepsilon}(t_i)$ -Werten ist eine Anpassung gar nicht mehr möglich.

- 2) “Direkte” Minimierung des relativen Fehlers mit Zielfunktion

$$Z(\{p_j\}) = \sum_{\text{Messpunkte}} \left(1 - \dot{\varepsilon}_{obs}(t_i) / \dot{\varepsilon}_{fit}(t_i; \{p_j\}) \right)^2$$

Mit der Modellfunktion im Nenner ist dies kein gewöhnliches Kurvenanpassungsproblem. Außerdem liefert diese Zielfunktion streuungsabhängig eine systematische Überschätzung des $\dot{\varepsilon}(t)$ -Verlaufs. Erforderlich ist daher eine Modifikation der Zielfunktion

$$Z(\{p_j\}) = \sum_{\text{Messpunkte}} \left(1 - f_{corr} \cdot \dot{\varepsilon}_{obs}(t_i) / \dot{\varepsilon}_{fit}(t_i; \{p_j\}) \right)^2$$

sowie eine nachträgliche Skalierung des Anpassungsergebnisses. Da die erforderlichen Korrekturfaktoren f_{corr} selbst vom Anpassungsergebnis abhängen, ist eine Lösung hier nur in einem aufwändigen iterativen Verfahren möglich.

- Verformungsraten $\dot{\varepsilon}(t_i)$ sind nicht direkt gemessen; ihre geeignete Berechnung aus den gemessenen Verformungen ist ein nicht triviales Problem (vgl. Kap. „Berechnung von Verformungsraten $\dot{\varepsilon}$ aus gemessenen ε -Werten“), ebenso ihre statistische Bewertung für die Unsicherheitsbestimmung.
- + Der $\dot{\varepsilon}(t)$ -Verlauf gibt wichtige Hinweise für die Wahl eines geeigneten Modells und eine gute Kontrolle der Eignung des verwendeten Modells.
- + Er gibt gute Kontrolle der Güte der Anpassungsergebnisse (auch für späte Zeiten) und der Eignung zur Extrapolation.
- + Der $\dot{\varepsilon}$ -Fit optimiert die Anpassung auch im i. A. besonders interessierenden Bereich sehr niedriger Verformungsraten, d. h. am Ende der Messreihe.
- + Die Identifikation von Zeitabschnitten, für deren Beschreibung das Modell nicht geeignet ist, gelingt leichter und zuverlässiger als bei der ε -Anpassung.

Fazit: Theoretisch hat die Parameterbestimmung durch Anpassung der Verformungsrate $\dot{\varepsilon}$ viele Vorteile. Praktisch ist aber das Problem der Bereitstellung hinreichend guter $\dot{\varepsilon}$ -Daten noch nicht zufriedenstellend gelöst, ebenso einige mathematische Probleme der Anpassung durch Minimierung relativer Abweichungen. Daher wird hier zunächst die Parameterbestimmung durch Anpassung der Verformung ε verwendet. Diese sollte aber mit der Nutzung von $\dot{\varepsilon}$ -Daten zu Kontrollzwecken verbunden werden, um die Schwächen der ε -Anpassung zu kompensieren.

ε -Fits: Möglichkeiten, Komplikationen und Fallgruben

Die Modellanpassung an die gemessenen Verformungen ε bietet eine mathematisch relativ einfache Möglichkeit zur Bestimmung von Kriechparametern und erweist sich dabei als ziemlich robust gegenüber statistischen Messunsicherheiten der ε -Daten.

Komplikationen ergeben sich aber zum einen aus der nicht-linearen Natur des Anpassungsproblems. Dies erfordert iterative Algorithmen, die Startwerte für die gesuchten Parameter p_1, \dots, p_m benötigen. Eine ungünstige Wahl der Startwerte führt oft dazu, dass der Algorithmus statt des globalen Minimums der Zielfunktion ein lokales Minimum findet. Eine so gefundene "Lösung" ist nicht optimal und kann weit von der richtigen Lösung abweichen.

Schwerwiegender ist die Empfindlichkeit der ε -Anpassung gegen Daten, die vom verwendeten Modell nicht gut beschrieben werden, also insbesondere gegen schnell abklingende Prozesse am Beginn eines Kriechversuchs oder nach Versuchsstörungen. Im Fall eines Power-Law-Modells ist dies selbst bei einem perfekten Versuchsablauf unvermeidlich, da jedes Power-Law-Modell für $t \rightarrow 0$ divergiert, den realen physikalischen Prozess also nahe am Prozess-Nullpunkt nicht korrekt beschreiben kann.

Die damit verbundenen Risiken einer nicht als fehlerhaft erkannten Parameterbestimmung kann gut an einem künstlichen Datensatz illustriert werden. Dieser repräsentiere Daten ohne statistische Messgenauigkeit (insofern also optimale Voraussetzungen für die Parameterbestimmung), bei denen sich den im Modell abgebildeten langzeitrelevanten Prozessen (langsam abklingendes Power-Law + stationärer Kriechterm) noch ein weiterer, schnell abklingender Power-Law-Prozess überlagert:

$$\dot{\varepsilon} = 2 \cdot 10^{-5} \text{ d}^{-1} \cdot (t/t_{dim})^{-0.3} + 2 \cdot 10^{-3} \cdot (t/t_{dim})^2 + 10^{-10} \text{ d}^{-1} \quad (14)$$

Die ε -Anpassung an diesen Datensatz liefert ein ausgezeichnetes Ergebnis ($R^2 = 0.9999$) und bis auf eine Abweichung bei den ersten 6 bis 7 Datenpunkten (von insges. 1306) weist nichts auf irgendwelche Probleme hin (Abb. 10). Erst der Vergleich des aus dem Fit resultierenden $\dot{\varepsilon}$ -Verlaufs mit dem wahren $\dot{\varepsilon}$ -Verlauf (orange) zeigt, dass der Fit die Verformungsraten über den gesamten Zeitbereich systematisch stark unterschätzt. Dem entsprechend sind auch die ermittelten Werte für die langzeit-relevanten Parameter b und ε_{stat} vollkommen unbrauchbar, obwohl sie nur geringe relative asymptotische Standardfehler aufweisen.

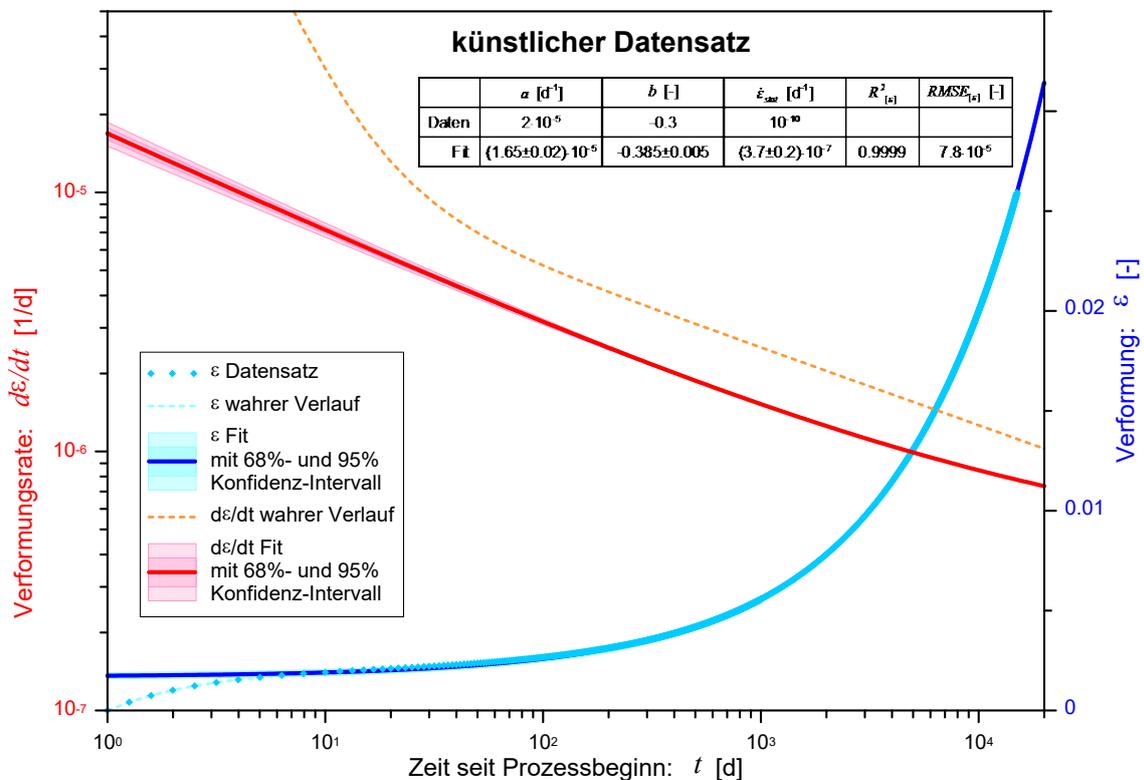


Abb. 10 ε -Anpassung des künstlichen Datensatzes für Daten des Zeitintervalls $1 \text{ d} \leq t \leq 15000 \text{ d}$

Da die Kenntnis des wahren $\dot{\varepsilon}$ -Verlaufs nur bei einem künstlichen Datensatz zur Verfügung steht, ist man bei realen Messdaten auf den Vergleich mit $\dot{\varepsilon}$ -Werten angewiesen, die aus den gemessenen ε -Daten berechnet werden. Diese Berechnung ist nicht trivial (vgl. Kap. „Berechnung von Verformungsraten $\dot{\varepsilon}$ aus gemessenen ε -Werten“) und tendiert in Zeitbereichen, in denen die $\varepsilon(t)$ -Kurve stärker gekrümmt ist, zur

Überschätzung der Verformungsraten, liefert aber trotzdem gute Hinweise auf fehlerhafte Parameterbestimmungen bei ε -Anpassungen (Abb. 11). Diese Abbildung illustriert auch, dass die Extrapolation der fehlerhafte Parameterbestimmung trotz einer scheinbar perfekten ε -Anpassung mit $R^2 = 0.9999$ auch für die Verformungen unbrauchbare Ergebnisse liefert.

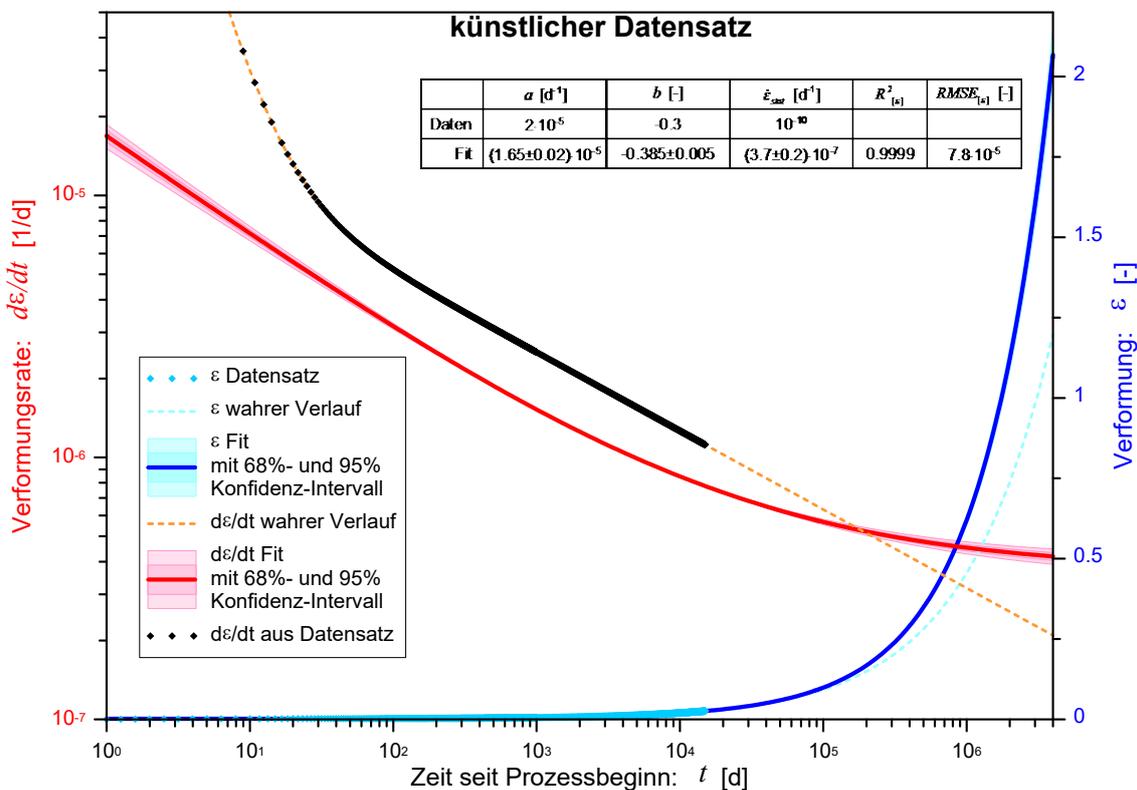


Abb. 11 Extrapolation der ε -Anpassung des künstlichen Datensatzes für Daten des Zeitintervalls $1d \leq t \leq 15000d$ bis auf ca. 10000 Jahre

Der scheinbare Widerspruch zwischen kleinen asymptotischen Standardfehlern der berechneten Parameter bei gleichzeitig sehr großen Abweichungen von den wahren Parameterwerten erklärt sich dadurch, dass die asymptotischen Standardfehler ausschließlich statistische Unsicherheiten der Parameterbestimmung beschreiben, also die Unsicherheit, die sich unter der Annahme ergibt, dass die Abweichungen zwischen den ε -Daten und dem Fit nur auf statistische, d. h. zufallsverteilte Unsicherheiten der Daten zurückzuführen sind. Liegen den Abweichungen aber wie im vorliegenden Fall systematische Fehler (korrupte Daten oder unvollständige Modellbeschreibung) zugrunde, so verfälscht dies die Parameterbestimmung, ohne dass es in der statistischen Analyse richtig erfasst und interpretiert werden kann.

Dies unterstreicht die überragende Bedeutung, die dem Ausschluss systematisch abweichender Daten aus dem Datensatz bei der Parameterbestimmung durch ε -Anpassung zukommt. Die Identifikation systematisch abweichender Daten ist anhand des ε -Fits oft nicht hinreichend möglich. Bei Ausschluss des einzigen erkennbar abweichenden Bereichs ($t \leq 7$ d, vgl. Abb. 10) verbessern sich zwar die ermittelten Parameterwerte etwas ($b = -0.3189 \pm 0.0013$ und $\varepsilon_{stat} = (9.6 \pm 0.6) \cdot 10^{-8} d^{-1}$), sind aber immer noch unbrauchbar.

Eine zuverlässigere Feststellung ungenügender Güte der Parameterbestimmung erlaubt dagegen die Betrachtung der Verformungsraten, die auf größere Modellabweichungen in einem längeren Zeitraum (ca. $t \leq 100$ d) hinweisen (vgl. Abb. 11). Der Ausschluss der Daten dieses Bereichs aus der Modellanpassung liefert dann sehr viel bessere, extrapolationstaugliche Ergebnisse (Abb. 12).

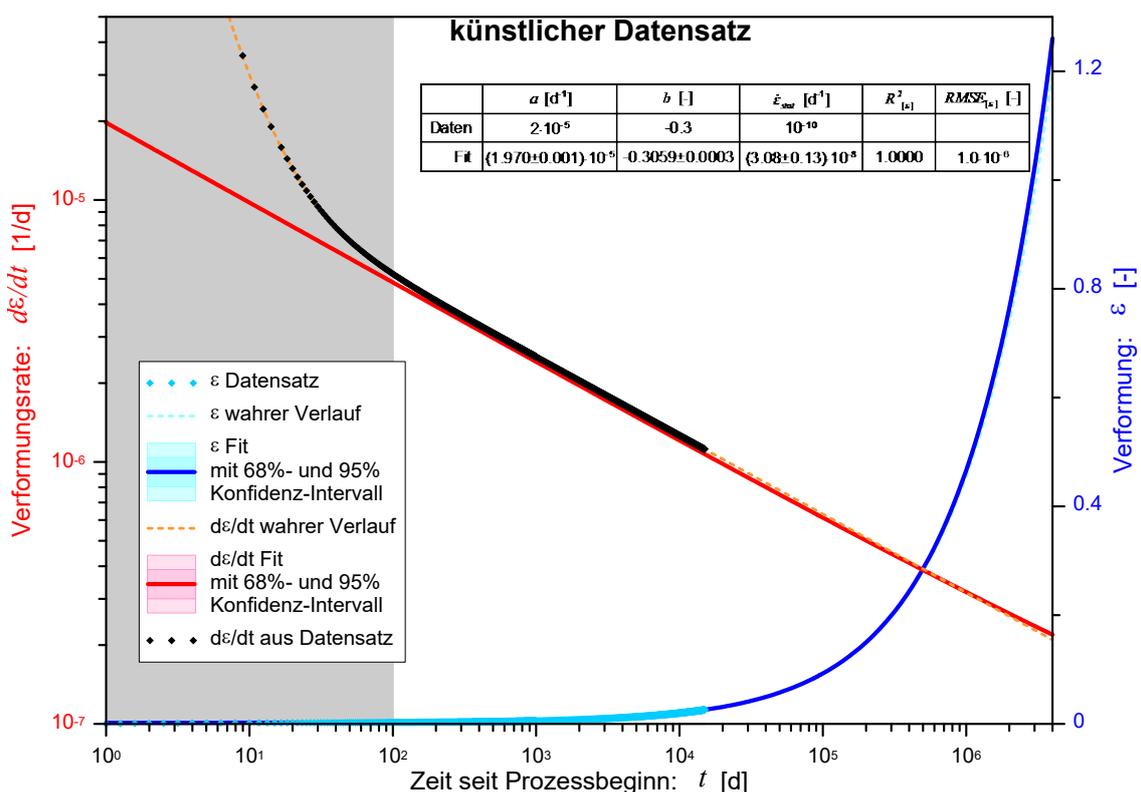


Abb. 12 Extrapolation der ε -Anpassung des künstlichen Datensatzes für Daten des Zeitintervalls $100 \text{ d} \leq t \leq 15000 \text{ d}$ bis auf ca. 10000 Jahre

Die Berechnung von Verformungsraten $\dot{\varepsilon}$ aus gemessenen ε -Werten

Verformungsraten werden i. A. als Steigung einer linearen Regression aus einer "geeigneten" Anzahl von $\varepsilon(t)$ -Messwerten berechnet:

$$\dot{\varepsilon}_{calc}(\bar{t}) = \frac{\sum_{i=i_0+1}^{i_0+m} (\varepsilon(t_i) - \bar{\varepsilon}) \cdot (t_i - \bar{t})}{\sum_{i=1}^m (t_i - \bar{t})^2} \quad (15)$$

mit $\bar{t} = \frac{1}{m} \cdot \sum_{i=i_0+1}^{i_0+m} t_i$ $\bar{\varepsilon} = \frac{1}{m} \cdot \sum_{i=i_0+1}^{i_0+m} \varepsilon(t_i)$

Was eine "geeignete" Anzahl von Messwerten ist, ist aber nicht einfach zu entscheiden:

- Zu wenige Werte führen zu einer zu großen Streuung der berechneten $\dot{\varepsilon}$ -Werte bis hin zu Abweichungen >100% und dem Auftreten negativer Werte.
- Zu viele Werte "verschmieren" den $\dot{\varepsilon}$ -Verlauf und verstärken die Tendenz zur Überschätzung der Verformungsraten in Bereichen mit stärkerer Krümmung der $\varepsilon(t)$ -Kurve.
- Daher variiert die "geeignete" Anzahl entlang des Messverlaufs (ggf. um mehrere Größenordnungen).

Ziel eines geeigneten Berechnungsverfahrens sollte sein, die Anzahl der Messwerte so zu wählen, dass die relative Unsicherheit $u_{rel}[\dot{\varepsilon}_{calc}] = u[\dot{\varepsilon}_{calc}] / \dot{\varepsilon}_{true}$ näherungsweise konstant ist und einen gewählten Wert $u_{rel}^{max}[\dot{\varepsilon}_{calc}]$ nicht überschreitet. Ein solches Verfahren lässt sich formulieren, wenn die ε -Messung in dem Sinne gutartig sind, dass sie eine normalverteilte, autokorrelationsfreie Unsicherheit mit konstanter Amplitude $u[\varepsilon]$ aufweist, d. h. es gilt

$$\varepsilon_{obs}(t) = \varepsilon_{true}(t) + u[\varepsilon] \cdot X$$

mit X = eine standardnormalverteilte, bzgl. t autokorrelationsfreie Zufallsvariable (16)

Man kann zeigen, dass mit Gl.15 daraus folgt

$$u[\dot{\varepsilon}_{calc}] = \frac{u[\varepsilon]}{\sum_{i=i_0+1}^{i_0+m} (t_i - \bar{t})^2} \quad \Rightarrow \quad u_{rel}[\dot{\varepsilon}_{calc}] = \frac{u[\dot{\varepsilon}_{calc}]}{\dot{\varepsilon}_{true}} = \frac{u[\varepsilon]}{\dot{\varepsilon}_{true}} \cdot \frac{I}{\sum_{i=i_0+1}^{i_0+m} (t_i - \bar{t})^2} \quad (17)$$

Für jede Berechnung eines $\dot{\varepsilon}$ -Wertes ist dann die Zahl m so zu wählen, dass die Bedingungen

$$\begin{aligned} u_{rel}[\dot{\varepsilon}_{calc}; m] &\leq u_{rel}^{max}[\dot{\varepsilon}_{calc}] \\ u_{rel}[\dot{\varepsilon}_{calc}; m-1] &> u_{rel}^{max}[\dot{\varepsilon}_{calc}] \end{aligned} \quad (18)$$

erfüllt sind. Dabei muss eigentlich die wahre Verformungsrate $\dot{\varepsilon}_{true}$ bekannt sein. Praktisch ist stattdessen der Schätzwert aus dem ε -Fit zu verwenden.

Alle gezeigten “gemessenen” $\dot{\varepsilon}$ -Werte wurden nach diesem Verfahren mit $u_{rel}^{max}[\dot{\varepsilon}_{calc}] = 0.1$ berechnet. Dabei zeigt sich, dass die tatsächlich erzielte relative Unsicherheit der berechneten $\dot{\varepsilon}$ -Werte viel größer ist als $u_{rel}^{max}[\dot{\varepsilon}_{calc}]$, die Voraussetzung aus Gl.16 also offensichtlich nicht erfüllt ist. Die zugrunde liegende Ursache betrifft grundsätzlich jeden Kriechversuch: Die Messgenauigkeit der verwendeten Messstrecken gewährleistet zwar die konstante Amplitude $u[\varepsilon]$ der Unsicherheit der Verformungsmessung, aber die Forderung, dass die Messunsicherheit eine normalverteilte, autokorrelationsfreie Zufallsvariable darstellt, wird durch Störungen der Zustandsgrößen im Versuch verletzt. Derartige Störungen führen durch systemimmanente Periodizitäten (z. B. durch Regelungszyklen für σ_0 und σ_{dif}) oder durch die Trägheit damit verbundener physikalischer Prozesse (z. B. bei Störungen der Temperatur) dazu, dass Autokorrelationen in den Abweichungen $\varepsilon_{obs}(t) - \varepsilon_{true}(t)$ auftreten. Damit ist Gl.17 aber nur noch dann näherungsweise erfüllt, wenn die Länge der zur Berechnung von $\dot{\varepsilon}_{calc}$ verwendeten Zeitintervalls $[t_{i_0+1}, t_{i_0+m}]$ sehr groß wird gegenüber den Autokorrelationslängen der ε -Störungen.

Exemplarisch erkennt man in Abb.4 die Wirkung von zwei Autokorrelationsrhythmen auf die $\dot{\varepsilon}$ -Berechnung: Zu Beginn sind deutlich Tagesgänge erkennbar, die für spätere Zeiten (wenn $t_{i_0+m} - t_{i_0+1} \gg 1 d$ erreicht wird) abklingen, dann aber von einem Wochenrhythmus abgelöst werden. Hintergrund ist die Einwirkung von Tages- und

Wohengängen der Raumtemperatur im Labor, die einen kleinen aber messbaren Einfluss auf die Messelektronik hat, die sich außerhalb des in der Maschine Temperaturregelten Bereichs befindet. Aufgrund dieser Autokorrelationen übersteigen die tatsächlich erzielten relativen Unsicherheiten $u_{rel}[\dot{\epsilon}_{calc}]$ die Zielvorgabe $u_{rel}^{max}[\dot{\epsilon}_{calc}]$ um ca. das 5-fache.

Ob sich durch den Einsatz von Fourier-Analysen, entweder zur Reduzierung autokorrelierter Störungen in den Daten oder direkt zur Verformungsratenberechnung, eine wesentliche Verbesserung der Bestimmung von $\dot{\epsilon}_{calc}$ erreichen lässt, ist Gegenstand laufender Arbeiten [Gräsle, W. 2024].

Literatur

[Gräsle, W. 2024] Gräsle, W.: Die Auswertung von Kriechversuchen – ein verbessertes Verfahren unter besonderer Berücksichtigung von Langzeitverhalten und Extrapolierbarkeit. BGR-Bericht, in prep.

1.13

N. Müller-Hoeppe¹:

Zusammenfassung der Erfahrungen aus dem Barrierebau mit abbindenden Baustoffen – „Lessons Learnt“

¹ BGE TECHNOLOGY GmbH, Peine, Deutschland

Email: nina.mueller-hoeppe@bge.de

Zusammenfassung

Aufbauend auf den Pilotbauwerken sukzessive gewonnen Erfahrungen und dem darauf basierenden Wissen, lässt sich feststellen, dass lösungsdichte und langzeitbeständige Abdichtbauwerke im Steinsalz errichtet werden können, wenn

- die Standortlokation des Bauwerks sich im Steinsalz befindet,
- die ALZ auf Basis von Messdaten in ausreichendem Maße entfernt wird,
- eine durchgehende Anbindung von Salzkontur und Baukörper erreicht wird,
- das Fluiddruckkriterium in der ALZ und der Kontaktzone ständig eingehalten wird, wobei durch einen Baukörper mit adäquater Steifigkeit, der den Gebirgsdruckaufbau begünstigt, und eine Standortlokation mit hoher Konvergenz² die Zeitdauer bis zum Erreichen der Dichtheit verringert,
- ein gegen korrosiven Angriff unter den realen Bedingungen eines Salzbergwerkes möglichst robuster Baustoff – Sorelbaustoff – gewählt wird,
- Schwächezonen erhöhter Permeabilität vermieden oder konstruktiv beherrscht werden, um lokalisierte Korrosion zu beschränken.

Der Routinebetrieb beim Bau von Strömungsbarrieren in der Schachanlage Asse zeigt, dass die großtechnische Umsetzung des Bauprozesses von Bauwerken aus Sorelbeton in Ortbetonbauweise gelungen ist und beherrscht wird und somit nunmehr Stand der Technik ist.

² Anders als für Streckenverschlüsse sind Standortlokationen hoher Konvergenz für Schächte ungünstig, da die Schachtfördereinrichtungen Verformungen nur in begrenzten Maße zulassen.

Einleitung

Seit dem Beginn der Konzipierung von Endlagern für radioaktiven Abfälle im Salzgestein waren Barrierebauwerke – Schacht- und Streckenverschlüsse - Bestandteil des Verschlussystems. Allerdings führte der Paradigmenwechsel von der begrenzten Freisetzung zum sicheren Einschluss von Radionukliden zu jeweils veränderten Anforderungen an die Verschlussbauwerke bzw. es haben sich die Einwirkungen und Prozesse, für die Verschlussbauwerke zu betrachten sind, verändert. Dies spiegelt sich auch in der Gestaltung des Verschlussystems und der Konstruktion der einzelnen Barrierebauwerke wider. Bei den realisierten Pilotbauwerken ist zu beachten, dass sie i.d.R. nicht der Zielstellung dienten, ein geplantes Endlager im Salz zu verschließen, sondern unter der Bedingung nicht idealer Standortlokationen der Testung von Verschlussoptionen für Einlagerungsbereiche von Abfällen in alten Bergwerken dienten.

An den realisierten Pilotbauwerken wurde sukzessive ein aufeinander aufbauender Erfahrung- und Wissensschatz gewonnen. Bestehende Modellvorstellungen wurden entweder bestätigt oder mussten revidiert werden, was ebenfalls zu Anpassungen der Bauwerkskonzeption und zu Verbesserungen führte.

Es zeigte sich, dass nicht nur die Rahmenbedingungen der Standortlokation eine wesentliche Rolle spielen, sondern auch die Bedingungen einer Baustelle, die sich von Laborbedingungen unterscheiden und die zu zusätzlichen Ungewissheiten aus dem Bauprozess führen, die zu berücksichtigen sind.

Für die Salinardichtung von Schachtverschlussbauwerke kommen als wesentliche Baustoffe Bentonit und Asphalt/Bitumen zum Einsatz. Diese Baustoffe zählen nicht zu den abbindenden Baustoffen. Unter der Salinardichtung angeordnete vertikal orientierte Komponenten des Verschlussystems aus abbindenden Baustoffen sind in der Regel einfacher herzustellen als Streckenverschlussbauwerke. Deshalb erfolgt im Folgenden die Konzentration auf Streckenverschlussbauwerke aus Salzbeton und Sorelbeton und die wesentlichen, aufeinander aufbauenden Erkenntnisse, die an ihnen gewonnen wurden.

Zeitliche Einordnung der Pilotbauwerke

Wie einleitend erwähnt, fand in Bezug auf die Endlagerung radioaktiver Abfälle ein Paradigmenwechsel statt, der sich in der Entwicklung des gesetzlichen Regelwerkes

widerspiegelt und in Folge dazu führte, dass für das Endlager unterschiedliche Szenarien betrachtet wurden und deshalb auch zu unterschiedlichen Konzeptionen bei den Verschlussystemen führte. Deshalb ist die zeitliche Einordnung der Pilotbauwerke in Verbindung mit dem jeweils geltenden Regelwerk und seinen Änderungen wichtig, um sie bewerten zu können (Abb. 1).

Während der Asse-Vordamm (Gorleben-Damm) unter den Vorgaben [BMI 83] mit einer Funktionsdauer von 500 Jahren konzipiert wurde, wurde allen übrigen Pilotbauwerken deutlich längere Funktionsdauern zugeordnet. Gemeinsam ist jedoch allen Pilotbauwerken, dass ihrer Konzeption abdeckende und früh eintretende Lösungszutrittsszenarien zugrunde lagen, da erst mit [BMU 10] und der auf der Grundlage durchgeführten vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) es zu dem Paradigmenwechsel kam [GRS 12a], [GRS 13], der zuerst zu der ESK-Forderung [ESK 13] für das ERAM führte. Seinen Abschluss fand der Paradigmenwechsel mit der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung [BMU 20].

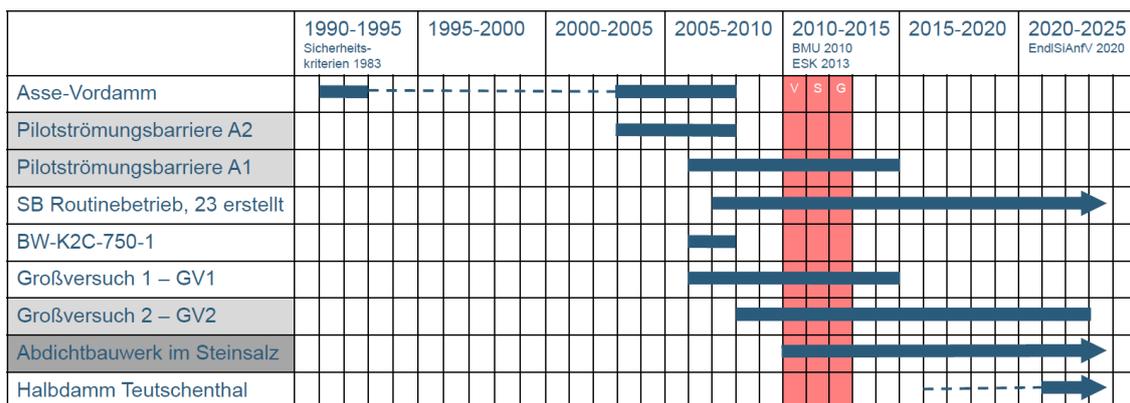


Abb. 1 Zeitliche Einordnung der Pilotbauwerke – Regelwerksänderung sind jeweils angegeben (Dauer der VSG rot hinterlegt)

Konzeption der Pilotbauwerke

Im Folgenden werden die Anforderungen, unter denen die Bauwerkskonzeption der Pilotbauwerke entwickelt wurde, zusammengefasst, da das Verständnis für ihre Konzeption nur in diesem Kontext möglich ist.

Asse-Vordamm

Der Asse-Vordamm wurde im Rahmen eines FuE-Projektes errichtet, das aufgegeben wurde. Er stellt das Zusatzwiderlager des ursprünglich geplanten Gorleben-Dammes dar (Abb. 2) und wurde 1991/92 in der Schachtanlage Asse auf der 945-m-Sohle aus Salz- beton erstellt. An das Zusatzwiderlager bestanden keine hydraulischen Anforderungen.

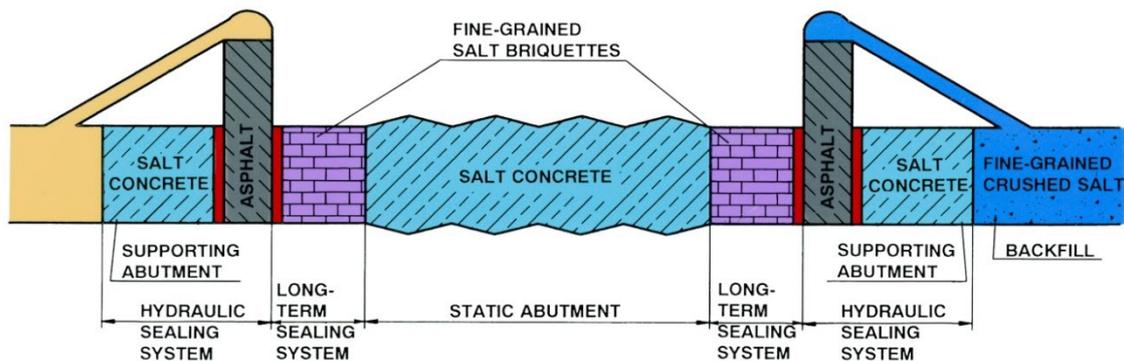


Abb. 2 Konzept des Gorleben-Dammes, das Zusatzwiderlager (supporting abutment) wird als Asse-Vordamm bezeichnet

Für das Streckenschlussbauwerk „Gorleben-Damm“ wurden basierend auf den Betrachtungen [ENG 88], [ENG 91] Belastungsszenarien für die Betriebsphase des Endlagerbergwerkes (begrenzter Lösungszutritt in die Grubenräume und Bergwerksbereiche; Radiolysegasentwicklung und natürliche Gaszutritte) und die Nachbetriebsphase (Wasser³ und Lösungszutritt aus dem Hauptanhydrit; Lösungszutritt aus der Salzformation; Wasserstoffgenerierung infolge Radiolyse; Zutritt von Erdgas) entwickelt. Aus den Belastungsszenarien wurden dann folgende technische Anforderungen abgeleitet:

- „...In Verbindung mit dem umgebenden Gebirge soll das Dammbauwerk technisch dicht gegenüber Flüssigkeiten und Gasen sein. Dabei schließt es die offenen Teile des Grubengebäudes bzw. die bereits abgeworfenen be- und verfüllten Teile gegen die Störmedien ab.

Die technische Dichtheit des Dammbauwerkes gegenüber Flüssigkeiten ist dabei zu einem möglichst frühen Zeitpunkt – bis spätestens 5 Jahre nach Fertigstellung – durch eine Damppermeabilität von $k \leq 2E-16 \text{ m}^2$ inkl. einer bestimmten Tiefe um das Dammbauwerk herum in das angrenzende Gebirge zu

³ Bei den größeren Zutrittsmengen über den Hauptanhydrit wurde davon ausgegangen, dass die Wässer sich an NaCl aufsättigen.

gewährleisten. Für die Gesamtdurchlässigkeit des Dammbauwerkes gegenüber Gasen gilt, dass die entsprechenden Gaskonzentrationen bzw. Aktivitäten – insbesondere auch in der Betriebsphase – auf der offenen und bewetterten Seite des Endlagerbergwerkes die zulässigen Grenzwerte deutlich unterschreiten.

- Durchörterte Schichten und tatsächliche oder potentielle Wegsamkeiten für Flüssigkeiten und Gase – gedacht ist hier an den Anhydrit – sollen technisch dicht durch Dammbauwerke gegen offene Teile des Grubengebäudes gesichert werden.
- Bezüglich ihrer Funktion sind Dammbauwerke so auszulegen, bis andere technische Barrieren, wie z.B. der Versatz, sie übernehmen. In Bezug auf Dammbauwerke wird von einer Funktionsfähigkeit von bis zu 500 Jahren ausgegangen. Wesentliche Voraussetzung für die Funktionsfähigkeit von Dammbauwerken ist ihre Standsicherheit. Als Auslegungskriterien für die Standsicherheit werden angenommen:
 - Auflaufende Gebirgskonvergenz
 - Flüssigkeits- und Gasdrücke bis zur Höhe des hydrostatischen Druckes von ca. 11 MPa (110 bar) am Ende der Betriebsphase von 50 – 60 Jahren auch bei einseitiger Belastung der Stirnfläche des Dammbauwerkes
 - Flüssigkeits- und Gasdrücke bis zur Höhe des petrostatischen Druckes von ca. 19 MPa (190 bar) in der Nachbetriebsphase auch bei einseitiger Belastung der Stirnfläche des Dammbauwerkes
- Dammbauwerke müssen wartungsfrei und im Rückbauverfahren zu erstellen sein.
- Die eingesetzten Dammbaumaterialien müssen gegen die unter Druck anstehenden Belastungsmedien Flüssigkeit und Gas korrosions- und temperaturbeständig sein. Temperaturbeständigkeit bedeutet nach [...] durchgeführten Modellrechnungen für ein mit hoch- und mittelaktiven Abfällen befülltes Endlager im Salz, dass von ca. 70°C in der Betriebsphase und von ca. 80°C in der Nachbetriebsphase auszugehen sein dürfte...“

Für den Gorleben-Damm wurde ein Pilotversuch in der Schachanlage Asse vorbereitet [FIS 91], [STO 91], [STO 94], [DRO 92], jedoch wurde das Bauwerkskonzept nach Teilerrichtung (Abb. 3) aufgegeben.

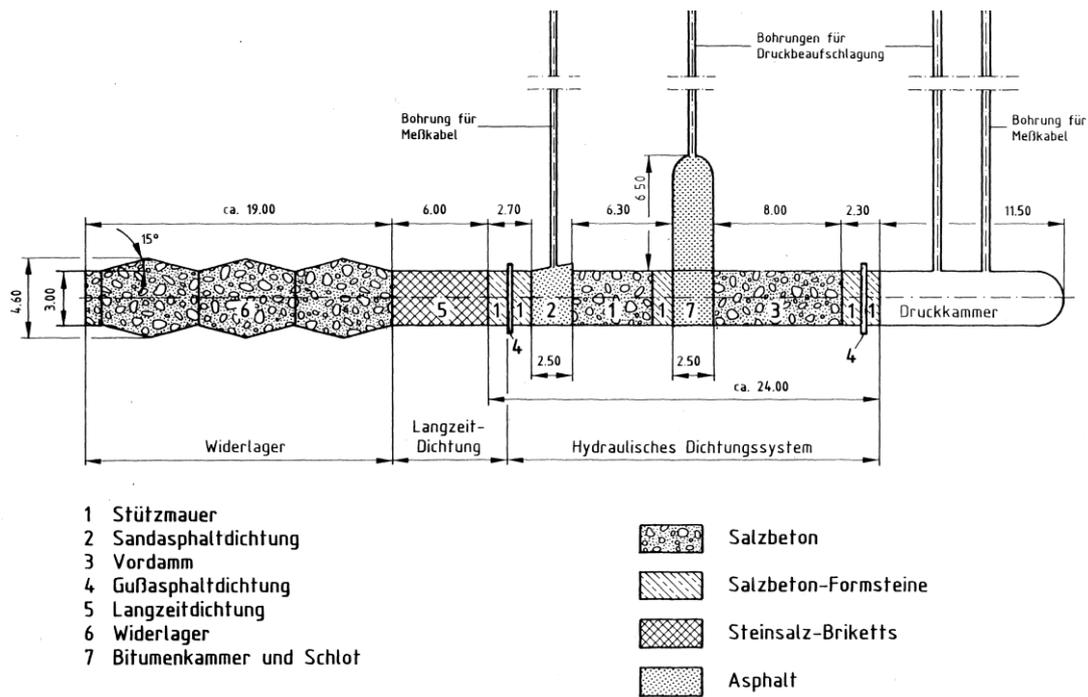


Abb. 3 Konzept des Pilotversuches für den Gorleben-Damm

Eine neue Bedeutung bekam der nunmehr als Asse-Vordamm bezeichnete, realisierte Teil des Pilotbauwerkes im Zusammenhang mit der Stilllegungsplanung für das ERAM. Im Rahmen der Stilllegung des ERAM waren ebenfalls Streckenverschlussbauwerke aus Salzbeton vorgesehen, bei denen die Anforderung bestand für den querschnittsgemittelten hydraulischen Widerstand einen Anfangswert zu gewährleisten, der sich bei einer Permeabilität $k \leq 1E-18 \text{ m}^2$ ergibt. Für die im ERAM vorgesehenen Streckenverschlussbauwerke wurde im Rahmen der Konzeptplanung ein Nachweis der Funktionsfähigkeit in Anlehnung an das bautechnische Regelwerk geführt [DBE 04].

Während für die Transportmodellierungen des Langzeitsicherheitsnachweises die parallel angeordneten Elemente einer gegenständlichen Abdichtung, nämlich Baukörper, Kontaktzone und Auflockerungszone des angrenzenden Gebirges, zusammengefasst werden, müssen diese drei Elemente bautechnisch unterschieden werden, da sie unterschiedliche hydraulische und mechanische Eigenschaften aufweisen. Jedoch wird die anforderungsgerechte Abdichtungswirkung erst durch ihre Kombination gewährleistet. Für die Kontaktzone sind gesonderte Untersuchungen erforderlich, weil gemäß technischem Regelwerk für Bauten des Umweltschutzes aus Beton [DAF 96], [DAF 97] die Durchlässigkeit von Fugenkonstruktionen (Kontaktzonen) an existierenden Bauwerken zu analysieren ist, wenn kein Prototyp zur Verfügung steht. Eine ausschließlich theoretische Betrachtung ist nicht zulässig.

Da der ASSE-Vordamm ebenfalls aus Salzbeton sowie nach vergleichbaren Konstruktionsprinzipien wie die im ERAM geplanten Abdichtungen errichtet wurde und für die Untersuchung der Kontaktzone zur Verfügung stand, wurde er als geeignetes Untersuchungsobjekt ausgewählt, um die Vorgaben des technischen Regelwerkes zu erfüllen. Am ASSE-Vordamm wurde ein Untersuchungsprogramm durchgeführt, mit dem Ziel, die Durchlässigkeit der Kontaktzone am Bauwerk in situ zu ermitteln. Die Untersuchungsergebnisse sind in [GLÄ 05] zusammengefasst.

Im Ergebnis der Untersuchungen zeigte sich, dass die Kontaktzone in der Firste eine sehr viel schlechtere Betonqualität und eine sehr viel höhere Permeabilität aufwies als in der Sohle und an den Stößen. Ursache war, dass die gerade Firstkontur per Hand verstopft wurde und die zusätzlichen Injektionen nicht ausreichten, um die Permeabilität auf ein vergleichbares Niveau zu heben, wie in den Bereichen, in denen bautechnisch eine gute Betonanbindung möglich war. Diese Lektion 1 wurde gelernt und bei allen folgenden Pilotbauwerken in Ortbetonbauweise die Firste angepasst an den Fließwinkel der Betonsuspension angeschrägt, so dass eine vollflächige Anbindung des Betons erreicht wurde.

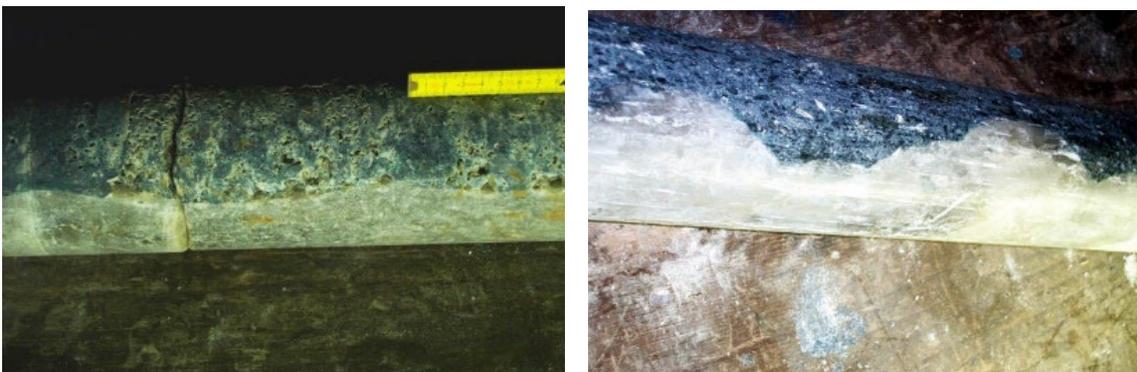


Abb. 4 Bohrkern aus dem Kontaktbereich Firste (links) und Sohle (rechts)

Pilotströmungsbarrieren A2 und A1

Für die ursprünglich vorgesehene Schließung der Schachtanlage Asse, für die aufgrund der Lösungszutritte eine trockene Verwahrung nicht mehr möglich war, wurde seinerzeit ein Schließungskonzept [FÖR 06] entwickelt, das u.a. der Bau von Strömungsbarrieren und Flutung der versetzten Grube mit einer $MgCl_2$ -Lösung vorsah, um die Auflösung der Kalilager durch zutretende $NaCl$ -Lösung zu verhindern. Weiterhin sollte durch Herstellung von Strömungskontrasten Lösungen in ausreichendem Maße an den Einlagerungs-

kammern vorbei gelenkt werden, wofür die Strömungsbarrieren dienten. Aufgrund der $MgCl_2$ -Lösung als Flutungslösung war die Nutzung eines Sorelbaustoffs unabdingbar⁴.

In Abb. 5 ist das Bauwerkskonzept dargestellt, das eine in Ortbetonbauweise hergestellte Kernbarriere zwischen zwei steifen Widerlagern vorsieht. Schon aus dem Konzept ist erkennbar, dass die Lektion der angeschrägten Firste gelernt war, bei deren Neigung der Fließwinkel der Baustoffsuspension berücksichtigt wird.

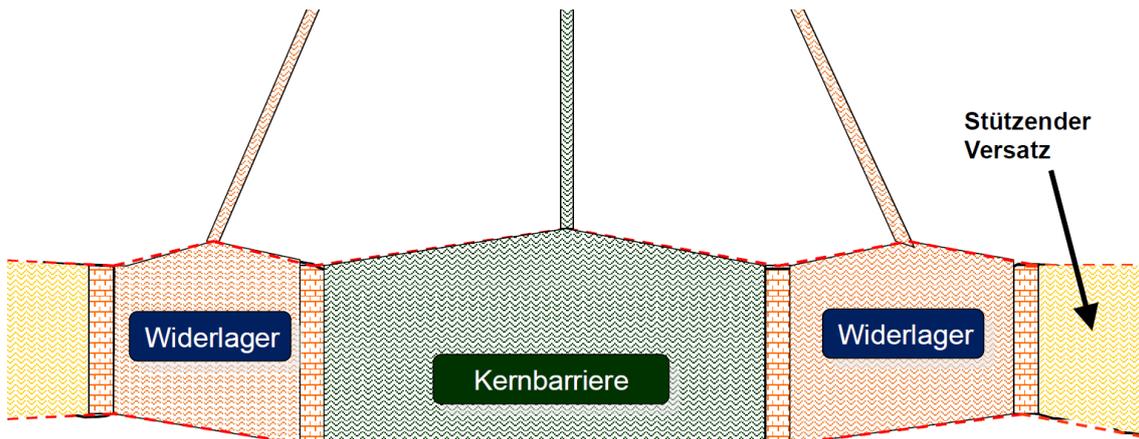


Abb. 5 Bauwerkskonzept für die söhligigen Strömungsbarrieren in der Asse

Zur Herstellung der Strömungskontraste mit Lenkungswirkung ist für die Strömungsbarrieren eine deutlich höhere Permeabilität zulässig als im Falle eines Abdichtungskonzeptes. So bestand für die Strömungsbarrieren die Mindestanforderung einer integralen Permeabilität von $5E-15 \text{ m}^2$, die für das Bauwerkskonzept gegenständlich zu belegen war. Zu diesem Zweck wurden die Pilotströmungsbarrieren A2 und A1 errichtet.

Pilotströmungsbarriere A2 (PSB A2)

Die Pilotströmungsbarriere wurde im Jahr 2002/03 am westlichen Ende der 2. südlichen Richtstrecke auf der 775-m-Sohle in der Schachanlage Asse im Steinsalz errichtet. Vor der Betonage wurde die Streckenkontur nach bergmännischer Erfahrung 0,2 – 0,5 m nachgeschnitten. An der Ortsbrust der Strecke wurde eine Druckkammer zur Lösungsdruckbeaufschlagung erstellt. Für den Baukörper kam anders als bei den steifen Widerlagern die geringpermeable ($2,5E-18 - 4,1E-20 \text{ m}^2$), aber vergleichsweise weiche

⁴ Mit der Entscheidung zur Rückholung der radioaktiven Abfälle aus der Asse wurde das Schließungskonzept hinfällig, jedoch wurde der Bau von Strömungsbarrieren in Verbindung mit der Gegenflutung des Grubengebäudes mit einer $MgCl_2$ -Lösung im Falle eines AÜL in das Notfallkonzept übernommen.

Sorelbetonrezeptur 29.6 A2 zum Einsatz. Die Sorelbetonrezeptur geringer Steifigkeit wurde entsprechend den damaligen Modellvorstellungen gewählt, um potenziell risserzeugende Spannungsspitzen durch einen harten Einschluss im Salz zu vermeiden. Das Pilotbauwerk wurde mit Messensoren bestückt zur Erfassung der Temperaturentwicklung im Bauwerk und der totalen Spannungen an der Kontur. Informationen zu den Messergebnissen finden sich in [MEY 08].

Aufgrund der geringen Permeabilität des Baustoffs, des Nachschnitts der ALZ und der vollflächigen Anbindung der Kernbarriere war nach Befüllung der Druckkammer ein langer Zeitraum von Jahren bis zum Austritt der Lösung an der Luftseite erwartet worden. Unerwartet kam es bereits nach 175 Tagen zum Lösungsdurchtritt, zuerst in der Sohle (Abb. 6) dann am Stoß und schlussendlich in der Firste. Es zeigte sich, dass die ALZ der maßgebliche Transportpfad war und Druckänderungen in der Druckkammer praktisch instantan zur Änderung der totalen Spannungen an der Kontur der Kernbarriere führten, die Spannungssensoren zeigten ein hydromechanisches Verhalten nach Terzaghi.



Abb. 6 PSB A2 – erster luftseitiger Austritt von Lösungen im Sohlbereich

Auch wenn die Mindestanforderung erfüllt war, war das Ergebnis enttäuschend. In der Folge wurden mögliche Ursachen diskutiert. Da der Haupttransportpfad die ALZ war, wurde zuerst der Nachschnitt als unzureichend identifiziert. Dazu ist anzumerken, dass ein Nachschnitt nach bergmännischer Erfahrung auf die Herstellung der Arbeitssicherheit abzielt, d.h. die Entfernungen lockerer Schalen in der Firste und an den Stößen und

nicht auf die Einhaltung eines geringen Permeabilitätsniveaus. Die Lektion 2, die Nachschnittdiefe der ALZ auf Basis einer ausreichenden Zahl von Messungen vorzugeben, wurde gelernt.

Als weitere Ursache wurde der geringpermeable, aber kompressible, weiche Baukörper identifiziert, der unter dem Druck der randlich vorlaufenden Lösung komprimiert wurde und so die Offenhaltung der Wegsamkeit über die ALZ begünstigte. Jedoch wurde auch festgestellt, dass mit dem zunehmenden konvergenzbedingten Auflaufen des Gebirges die Permeabilität abnahm. Dies war ein wesentlicher Indikator dafür, dass der Aufbau des Gebirgsdruckes eine wesentliche Rolle für die Permeabilität der ALZ spielt - Lektion 3. Da ein steifer Baustoff den Gebirgsdruckaufbau begünstigt, wurde unter Berücksichtigung der gelernten Lektionen eine weitere Pilotströmungsbarriere – die PSB A1 gebaut.

Pilotströmungsbarriere A1 (PSB A1)

Die PSB A1 wurde 2006 in einem Streckenstummel im ehemaligen Dammbaufeld auf der 945-m-Sohle an einem Standort im Steinsalz errichtet. Es kam wiederum das Bauwerkskonzept gemäß Abb. 5 zur Anwendung. Allerdings erfolgte vor der Betonage ein Nachschnitt der Streckenkontur auf der Basis von Permeabilitätsmessungen, so dass im Ergebnis die Strecke bis zu 1 m nachgeschnitten wurde. Für die Kernbarriere kam nun der steifere Sorelbeton A1 zum Einsatz. Das Pilotbauwerk wurde mit Messsensoren zur Erfassung der Temperaturentwicklung, der totalen Spannungen und der Porendrücke bestückt. Informationen zu den Messergebnissen finden sich in [HEY 15], [HEY 16].

Es zeigte sich, dass die Wahl des steifen Baustoffes den Gebirgsdruckaufbau beschleunigte, so dass die Porendrücke ständig unter den totalen Radialspannungen in der Gebirgskontur lagen, d.h. es wurde – wie es heute bezeichnet wird - das Fluiddruckkriterium ständig eingehalten. Der Druck in der Druckkammer wurde durch den Lösungspegelstand auf der oberen Sohle gesteuert. Druckabfälle durch Ablauf von Lösung wurden nicht registriert; es zeigte sich kein hydromechanisches Verhalten nach Terzaghi. Damit war auch ohne genauere Untersuchungen offensichtlich, dass die PSB A1 eine deutlich geringere Permeabilität aufwies als die PSB A2. An der PSB A1 wurde gelernt - ein adäquater Nachschnitt vorausgesetzt -, dass die ständige Einhaltung des Fluiddruckkriteriums den ALZ-Transport verhindert.

Pilotbauwerk BW-K2C-750-1

Das Pilotbauwerk BW-K2C-750-1 hat seinen Standort im Carnallitit. An ihm sollte überprüft werden, ob die Temperaturentwicklung des Sorelbeton A1 bei seiner Erhärtung zu maßgeblichen Schädigungen an der carnallitisch ausgebildeten Salzkontur führt. Gemäß der Zielsetzung ist das Bauwerk nicht mit Salzlösung beaufschlagt, sondern nach Betonage und Abklingen der erhärtungsbedingten Temperaturerhöhung erfolgten Permeabilitätsmessungen mit Gas in der Kontaktzone. Die Messergebnisse lagen in der Bandbreite von $6,3E-16 \text{ m}^2$ und $1,2E-17 \text{ m}^2$ und erfüllten somit bereits die (geringe) Anforderung an die Bauwerkspermeabilität von $5E-15 \text{ m}^2$ zur Herstellung der Strömungskontraste. Im Ergebnis erwies sich so das Bauwerkskonzept auch für Standorte im Carnallitit der Asse als geeignet.

Bau von Strömungsbarrieren im Routinebetrieb

Nach dem erfolgreichen Test der PSB A1 wurden in der Schachtanlage Asse bis heute 23 söhlige Strömungsbarrieren (SB) im großtechnischen Routinebetrieb errichtet. Auch seigere Strömungsbarrieren (SBS) wurden betoniert [HEY 18], da sie aber ohne Relevanz für die Stilllegung ERAM sind, wird auf sie hier nicht weiter eingegangen.

In situ-Versuch „Abdichtbauwerk im Steinsalz“

Abweichend von der zeitlichen Abfolge der Errichtung wird im Folgenden zuerst auf den Pilotversuch „Abdichtbauwerk im Steinsalz“ eingegangen, weil das Abdichtbauwerk im Steinsalz – wie der Name schon sagt, im Steinsalz errichtet wurde und die gelernten Lektionen aus den vorgenannten Bauwerken berücksichtigt wurden.

Für das Bauwerk wurde der Baustoff Salzbeton gewählt, da das Anstehen von NaCl und MgCl_2 -Lösungen am Bauwerk als gleichwahrscheinlich angesehen wurde [HER 05] und weiterhin ein vergleichbares Korrosionsverhalten von Salz- und Sorelbeton angenommen wurde, wobei der Salzbeton als langzeitbeständig gegenüber gesättigter NaCl-Lösung und Sorelbeton als langzeitbeständig gegenüber MgCl_2 gesättigter Lösung galt⁵. Als Anforderung an das Bauwerk war neben der mechanischen Integrität eine integrale

⁵ Gesättigte NaCl-Lösungen und IP21-Lösung dienten seinerzeit als Referenzlösungen zur Beschreibung der Lösungsbandbreite.

Permeabilität von $1E-18 \text{ m}^2$ formuliert, um die Funktionsfähigkeit des Bauwerks für einen ausreichenden Zeitraum zu erreichen [MAU 07].

Da Salzbeton schwindet, waren Trennbleche quer zur Strömungsrichtung zur Lokalisierung von Rissen infolge thermischer Kontraktion und autogenem Schwinden im Baukörper sowie eine umlaufende Ringinjektion zwischen Salzkontur und Baukörper zum Verpressen von Abrissen an der Salzkontur in Folge der beiden genannten Ursachen vorgesehen [BFS 07]. Die Injektionsleitungen wurden in einem Hüllrohr gebündelt, das nachträglich ausgebohrt und verpresst werden sollte. Das Bauwerkskonzept ist in Abb. 7 dargestellt.

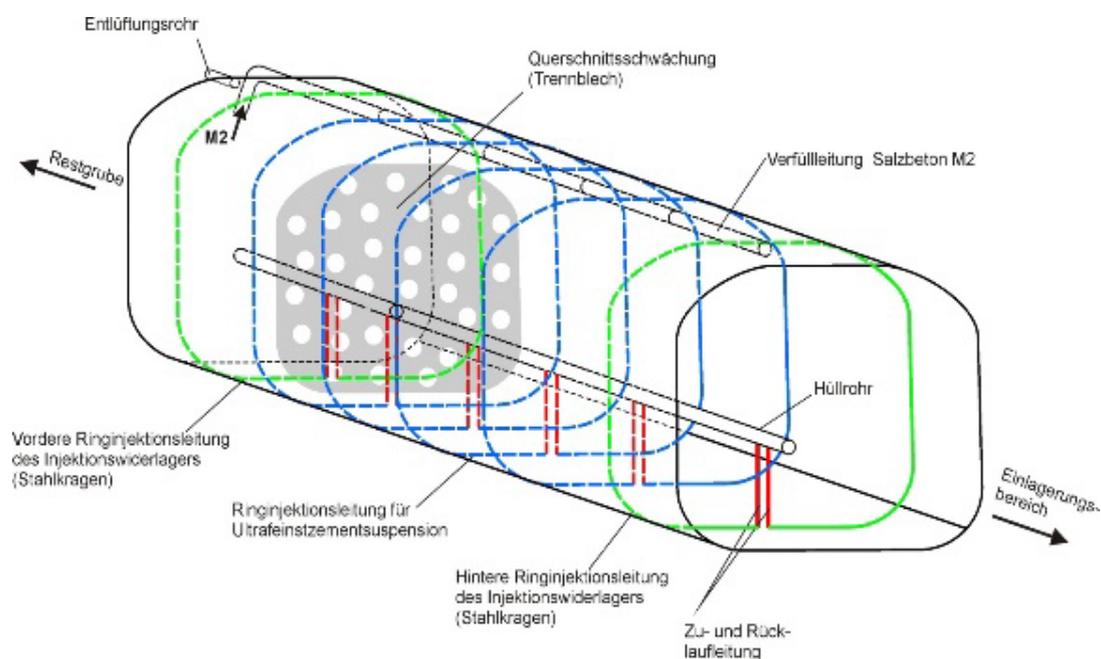


Abb. 7 Bauwerkskonzept

Das „Abdichtbauwerk im Steinsalz“ wurde 2010 in einem neu aufgefahrenen Streckenstummel auf der 2. Sohle Bartensleben in ca. 410 m Teufe errichtet, um seine Herstellbarkeit und seine Funktionsfähigkeit zu belegen. Das Pilotbauwerk wurde in dem Streckenstummel mit geneigter Firste in Ortbetonbauweise errichtet, wobei die ALZ vorher auf der Basis von Messungen entfernt worden war. Das Pilotbauwerk war in fünf Messquerschnitten (Abb. 8) mit Messsensoren zur Erfassung der Temperaturentwicklung, der totalen Spannungen, der Porendrücke, der Dehnungen und des Schwindens bestückt. Informationen zu den Messergebnissen finden sich in [DBE 12], [MAU 12], [MAU 13], [MAU 14], [WOL 19].

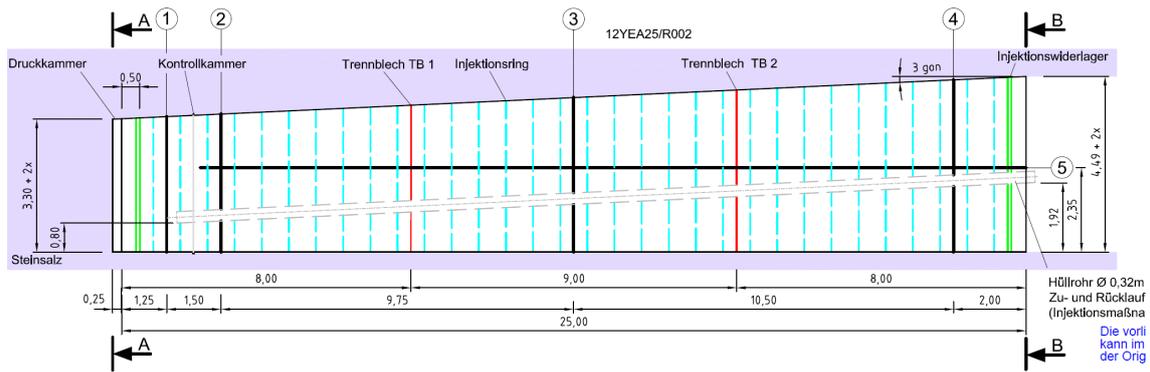


Abb. 8 Realisiertes Pilotbauwerk

Die Druckbeaufschlagung mit NaCl-Lösung erfolgte über eine Druckkammer an der Ortsbrust des Streckenstummels, wobei der Druck in der Druckkammer so gesteuert wurde, dass das Fluiddruckkriterium erfüllt wurde und die Porendrücke unter den totalen Radialspannungen verblieben.

An dem Bauwerk wurde (bisher) kein Durchtritt von Lösung an der Luftseite festgestellt, so dass die integrale Permeabilität über die Ablaufrate ermittelt wurde. Diese nahm von anfänglich $3,1E-18 \text{ m}^2$ um mehr als eine Größenordnung ab. Durch diesen Versuch ist belegt, dass es möglich ist, lösungsdichte Verschlussbauwerke aus Ortbeton an Standorten im Steinsalz zu errichten, wenn das aus früheren Versuchen Gelernte berücksichtigt wird.

Großversuche 1 und 2 in Teutschenthal (GV1, GV2)

Im Rahmen des FuE- Vorhabens „Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leichtlöslichen Salzgestein (Carnallit)“ für UTD/UTV (CARLA) [KNO 05] wurden zwei Pilotbauwerke aus abbindenden Baustoffen errichtet [KNO 10]. Bedingt durch die sehr schwierigen Standortlokationen im Carnallit – Kieserit ist mit Tachyditlagen vergesellschaftet – kamen Sorelbaustoffe zum Einsatz. Aufgrund des konturnahen Gebirgsbereiches, der hier eine Verwitterungszone darstellt, kam der Temperaturbegrenzung bei der Erhärtung der Sorelbaustoffe eine hohe Bedeutung zu. Es kamen zwei technische Konzepte zur Erprobung – GV1 und GV2, die Gegenstand der FuE-Vorhaben CARLA [KNO 05], [KNO 10], MgO-SEAL [KUD 20], MgO-S³ [GRU 23] waren. Die beiden Pilotbauwerke wurden in von einer Versuchsstrecke ausgehenden Stummelstrecken auf der 3a-Sohle in Teutschenthal in 723,45 m Teufe erstellt. Von einer Begleitstrecke aus ist die Druckbeaufschlagung der Druckkammern mit Gas oder Flüssigkeit möglich.

GV1

Für GV1 kam ein MgO-Ortbeton zum Einsatz, der blockweise zu einem kegelförmigen Propfen in 2006/07 betoniert wurde. Abb. 9 gibt eine Übersicht über die Abmessungen des Bauwerks sowie die Mächtigkeit der Betonageblöcke. Vor der Betonage eines Blockes wurde jeweils eine Holzschalung aufgestellt, hinter die der Beton eingefüllt wurde. Die Betonblöcke haben eine durchschnittliche Mächtigkeit von ca. 0,65 m. Im Bauwerk wurden zwei Messebenen zur Messung der Kontaktdrücke eingebaut sowie die Kontaktzone über umlaufende Ringinjektionsleitungen mit 2K-Injektionsbitumen verpresst. Das Pilotbauwerk war mit Messensoren zur Temperaturentwicklung, Spannungsentwicklung und Feuchtesensoren bestückt.

Die Ergebnisse pneumatischer Vortests ergaben nach Injektion anfangs eine integrale Permeabilität für GV1 von $1E-12 \text{ m}^2$. Da GV2 eine geringere Anfangspermeabilität zeigte wurde GV1 nicht weitergeführt.

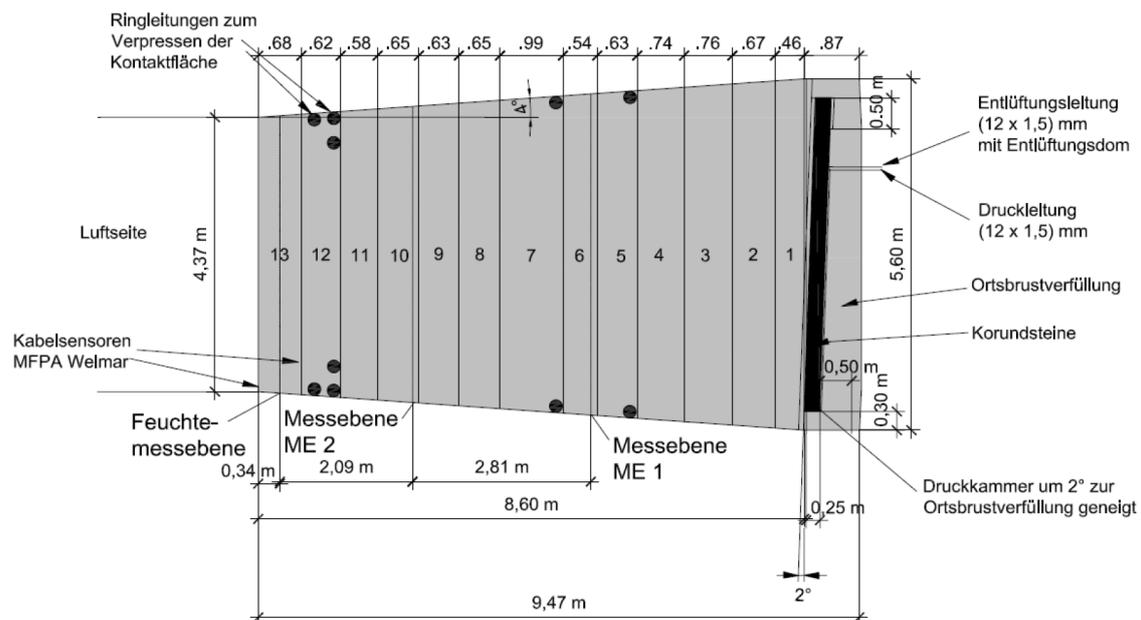


Abb. 9 Pilotbauwerk GV1

GV2

Für GV2 kam ein die Verwitterungszone schützender MgO-Spritzbeton zum Einsatz, der im Jahr 2008 in 104 Lagen gespritzt wurde, was eine durchschnittliche Mächtigkeit der Spritzbetonlagen ca. 10 cm bedeutet. Abb. 10 gibt eine Übersicht über die Geometrie des Bauwerks und die Spritzbetonlagen. Der Querschnitt des Bauwerks ist nahezu quadratisch. Das Bauwerk wurde mit Messsensoren zur Erfassung von Temperatur- und Druckentwicklung sowie der Feuchte bestückt. Informationen zu den Messergebnissen finden sich in [KUD 20], [GRU 23].

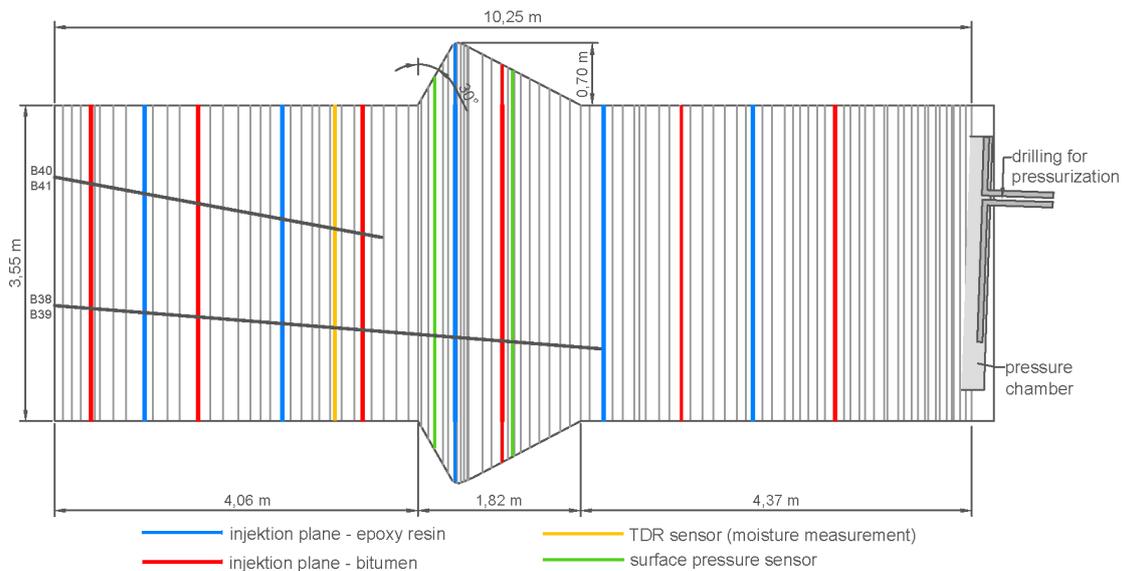


Abb. 10 Pilotbauwerk GV2

Die Ergebnisse pneumatischer Vortests ohne Injektion ergaben anfangs eine integrale Permeabilität vom $2E-14 \text{ m}^2$. In der Folge wurde das Konzept GV2 weiterverfolgt.

Aufgrund des geringen Gebirgsdruckes wurde vorerst auf die vorgesehene Druckbeaufschlagung des Bauwerkes mit Lösung verzichtet, jedoch wurden im Zeitraum 2008/09 in Verbindung mit 5 Injektionsmaßnahmen pneumatische Tests durchgeführt, in 2015 erfolgte ein weiterer pneumatischer Bauwerkstest. Während nach den Injektionsmaßnahmen sich Bauwerksp permeabilität um bis zu etwa 3 Größenordnungen verringert hatte, ergab sich in 2015 mit $1E-14 \text{ m}^2$ eine integrale Permeabilität in der Größenordnung des Anfangswertes. Die Detektion von Tracergas zeigte die Dominanz der Randläufigkeiten, d.h. die Verwitterung war schneller fortgeschritten als der Verschluss des Kontaktbereiches durch die auflaufende Gebirgskonvergenz. Als Lektion aus GV2 lässt sich mitnehmen, dass es Lokationen im Salz gibt, die nicht abgedichtet werden können.

Schlussendlich erfolgte eine Lösungsdruckbeaufschlagung des Bauwerks GV2. Auch wenn keine integrale Permeabilität ermittelt wurde, zeigten die Druckmessgeber ein hydro-mechanisches Verhalten nach Terzaghi [KUD 20] analog zur PSB A2, was die Größenordnung des integralen Permeabilitätsniveaus aus den pneumatischen Tests bestätigt.

Halbdamm Teutschenthal (STROEFUN)

Der Halbdamm Teutschenthal wurde 2021 in Ortbetonbauweise in ca. 678 m Teufe der Grube Teutschenthal aus einer an die Mischtechnik angepassten Rezeptur des Sorel-beton A1 erstellt. Gegenstand der Untersuchungen war/ist die Permeabilität der Kontaktzone zwischen Salzkontur und Baukörper und ihre Entwicklung. Zu diesem Zweck wurde ein spezielles, zerstörungsfrei messendes Messsystem entwickelt, das in der Lage ist Permeabilitätsveränderungen der Kontaktzone durch Wiederholungsmessungen zu erfassen. Das Messsystem wurde erfolgreich in situ an dem Halbdamm in Teutschenthal getestet [WEB 16], [WEN 18], [BAU 23]. Aufgrund der Laufzeit des Versuchs und der bisher geringen Zahl der Wiederholungsmessungen lässt sich jedoch noch keine Aussage zur zeitlichen Entwicklung ableiten.

Langzeitbeständigkeit – Korrosion von Salz- und Sorelbeton

So lässt sich nun als Zwischenfazit ziehen, dass mit Streckenverschlüssen aus Salzbeton und Sorelbaustoffen an geeigneten Standortlokalationen im Steinsalz ein hoher hydraulischer (Anfangs-)Widerstand bzw. eine hohe, anfängliche Abdichtwirkung erzielt werden kann. Allerdings können beide Baustoffgruppen von korrodierenden Lösungen angegriffen werden, wobei - wie bereits erwähnt - der Salzbeton von $MgCl_2$ -Lösungen korrodiert wird, auch wenn sie NaCl-gesättigt sind, während Sorelbaustoffe von $MgCl_2$ -armen Lösungen angegriffen werden. Da die notwendigen Funktionszeiträume der Streckenverschlussbauwerke sich über die anfänglich geforderten 500 Jahre deutlich verlängert hatten, z.B. auf 5.000 - 30.000 im Falle des ERAM [MAU 07], kam der Fragestellung der Langzeitbeständigkeit der Streckenverschlüsse nun eine hohe Bedeutung zu.

Im Zusammenhang mit den FuE-Vorhaben [KNO 10], [KUD 20] wurden umfangreiche Untersuchungen zur geochemischen Stabilität der MgO-Baustoffe durchgeführt. Diese Untersuchungen führten zur Erweiterung des thermodynamischen Stabilitätsfeldes der langzeitstabilen 3-1-8 Phase von MgO-Baustoffen, deren Stabilität bereits bei einer $MgCl_2$ -Teilsättigung der angreifenden Lösung von $0,5 \text{ mol } Mg^{2+}/\text{kg } H_2O$ gegeben ist [FRE 11].

Dieses Ergebnis stand rechtzeitig im Verlauf der vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben [GRS 13] zur Verfügung, in der der Paradigmenwechsel von der bedingten Freisetzung zum sicheren Einschluss erstmalig im Rahmen umfassenden Systemanalyse betrachtet wurde [GRS 12a]. Da die Integrität der Salzbarriere auf Basis der geowissenschaftlichen Standortbeschreibung [BOR 02] und Langzeitprognose [GRS 11] unter den abgeleiteten Szenarien [GRS 12b] gezeigt werden konnte [GRS 12c], kamen als potentielle Zutrittspfade nur noch die Schächte in Frage. In ihrem räumlichen Nahbereich wurden planerisch Bischofitdepots [GRS 12d] vorgesehen, da eine über die Schächte zutretende NaCl-gesättigte Zutrittslösung sich an $MgCl_2$ aufsättigt. Da aber nur noch eine Teilsättigung erforderlich war, war die notwendige Größe der Bischofitdepots zur Aufsättigung der Zutrittslösung akzeptabel [XIE 12]. Folglich wurden die Streckenschlüsse zur Abdichtung der Einlagerungsfelder aus Sorelbeton A1 geplant. Das Bauwerkskonzept wurde in Anlehnung an die Strömungsbarrieren in der Asse gewählt, da alle Standortlokationen planerisch im Steinsalz angeordnet waren [GRS 12d], [GRS 12e]. Im Ergebnis der VSG wurde gezeigt, dass in einem geplanten Endlager im Steinsalz der sichere Einschluss der radioaktiven Abfälle realisiert werden kann, womit im Hinblick auf die Schadensvorsorge für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle ein neuer Stand von Wissenschaft und Technik erreicht wurde.

Als Konsequenz auf den neuen Stand von Wissenschaft und Technik wurde in Bezug auf das laufende Genehmigungsverfahren zur Stilllegung des ERAM im Jahr 2013 seitens der ESK empfohlen [ESK 13], sich für das ERAM an die Vorgehensweise der VSG anzulehnen. Diese Empfehlung wurde umgesetzt, es erfolgte eine Anpassung des Sicherheitskonzeptes und der Vorgehensweise zur Sicherheitsbewertung in Anlehnung an den Safety Case der VSG. Daraus ergab sich eine Optimierung des Stilllegungskonzeptes ERAM. Die wesentlichen Modifikationen sind nachstehend zusammengefasst:

- Im Rahmen der zu erwartenden Entwicklung des Endlagersystems ERAM ist ein maßgeblicher Lösungszutritt lediglich über das Lager H zu betrachten. Über die Schächte treten nur geringe Lösungsmengen zu. Dementsprechend sind als

Optimierung zusätzliche Abdichtungen für das Lager H in das Stilllegungskonzept integriert.

- Für das ERAM werden in Anlehnung an die Vorgabe einschlusswirksame Gebirgsbereiche auszuweisen vier Bereiche mit Einschlusswirkung ausgewiesen, und zwar Ostfeld, Zentralbereich, Südfeld und Westfeld. Sie sind durch Streckenabdichtungen voneinander getrennt.
- Über das Lager H sind $MgCl_2$ -reiche Salzlösungen zu erwarten, so dass MgO-Baustoff für die Streckenabdichtungen gegenüber diesen Lösungen langzeitbeständig ist. Konsequenterweise wurde daher auch die Baustoffwahl der Streckenabdichtungen zu Magnesiabaustoff geändert.
- Es erfolgt eine langzeitliche Analyse des Endlagersystems als Gesamtsystem hinsichtlich Einhaltung der Schutzziele verbunden mit einer bewertenden Analyse seiner Komponenten. Anforderungen an die individuellen Streckenabdichtungen werden nicht abgeleitet, sondern ihre Eigenschaften werden unter Ausweisung der bestehenden Ungewissheiten im Bewertungszeitraum bewertet.

In Bezug auf den Barrierebau beinhaltet dies die nachstehend behandelten Ungewissheiten zur lokalisierten Korrosion.

Ungewissheit lokalisierte Korrosion

Wie vorstehend aufgeführt, sind bestehende Ungewissheiten auszuweisen. Im Hinblick auf eine potenzielle Korrosion der Streckenverschlüsse soll abschließend die lokalisierte Korrosion betrachtet werden. Für eine lokalisierte Korrosion müssen ausgedehnte Schwächezonen mit höherer Permeabilität vorhanden sein, denn zufällig verteilte, lokale Schwächezonen in begrenzter Zahl spielen für die Funktion des Barrierebauwerks praktisch keine Rolle [RÖH 14]. Als potenzielle Schwächezonen wurden Betonierabschnittsgrenzen/Betonierfugen, entweder konstruktiv bedingt oder ungeplant durch längere Betonageunterbrechungen entstanden, Risse (Trennrisse) und die Kontaktzone zwischen Baukörper und Wirtsgestein Steinsalz identifiziert.

Betonierabschnittsgrenzen/Betonierfugen

Die Betonierabschnittsgrenzen des Großversuchs GV2 sind durch die Spitzbetonbauweise konstruktiv bedingt und wurden bzgl. ihrer Lösungspemeabilität mittels zwei Bohrungen gezielt untersucht. Die eine Bohrung (B38) wurde mit NaCl-Lösung beaufschlagt, die andere Bohrung (B39) mit $MgCl_2$ -Lösung. Aus dem Ergebnis lässt sich vorläufig

schlussfolgern, dass Betonierabschnittgrenzen keine maßgeblichen Schwächezonen darstellen [KUD 20].

Bei der Betonage des Halbdamms in Teutschenthal entstanden Betonierfugen ungeplant durch Betonageunterbrechungen. Exemplarische Permeabilitätsmessungen mit Gas zeigten - abgesehen von einem oberflächennahen Wert - Permeabilitätswerte in der Bandbreite des Baustoffs [BAU 23].

Risse (Trennrisse)

Im Falle des Abdichtbauwerks im Steinsalz wurden Risse festgestellt, die durch thermische Expansion und Kontraktion sowie durch Schwinden bedingt waren, während im Falle des Halbdamms in Teutschenthal Risse nahe der Ortsbrust des Baukörpers in Folge fehlender Einspannung bei thermischer Expansion und autogenem Quellen auftraten. Hier sind konstruktive und betontechnologische Maßnahmen verfügbar, um räumlich ausgedehnte Trennrisse zu vermeiden, zu minimieren oder unschädliche Sollbruchstellen zu schaffen (z.B. [GUT 99]), die bei Bedarf angewendet werden können.

Kontaktzone zwischen Baukörper und Wirtsgestein Salz

Dass die Kontaktzone zumindest einige Zeit nach Bauwerkerrichtung sowohl für Salz- und Sorelbetonbauwerke eine Schwächezone erhöhter Permeabilität darstellt, ist durch Messergebnisse belegt. Dass die Kontaktzone durch Aufkriechen des Steinsalzes sich wieder schließt und das Permeabilitätsniveau von Steinsalz erreichen kann, wurde am Asse Vordamm sowie am Abdichtbauwerk im Steinsalz für Bauwerke aus Salzbeton anhand von Laborversuchen belegt und lässt sich indirekt aus den in situ Messergebnissen schlussfolgern.

Für Sorelbeton sind exemplarische Messwerte aus der Schachanlage Asse vorhanden, die indikativ belegen, dass dieser Prozess auch im Falle von Sorelbeton auftritt. Weitergehende Untersuchungen der zeitlichen Veränderung der Permeabilität der Kontaktzone finden aktuell mit Hilfe des im FuE-Projekt STROEFUN entwickelten Messsystems am Halbdamm in Teutschenthal statt.

Danksagung

Der Bau der Pilotbauwerke zum Verschluss von Endlagern für Abfälle ist ein Prozess, der nunmehr mehr als 30 Jahre in Anspruch genommen hat und aktuell im Rahmen des Stilllegungsverfahrens Morsleben weitergeführt wird.

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die bisher zu diesem Prozess beigetragen haben - den Kolleginnen und Kollegen der BGE und BGETEC (früher GSF, HMGU, Asse GmbH, BfS, DBE, DBETEC), den Partnern aus den Forschungseinrichtungen TU Clausthal, TU Bergakademie Freiberg, TU Braunschweig, GRS-Braunschweig (früher GSF), Helmholtzzentrum Rossendorf und den Partnern und Auftragnehmern IBeWa, K-UTEC, GmuG, IfG, TS-Bau, GTS sowie den finanziellen Förderern der Projekte BMBF; BMWi; und BMUV.

Auch wenn auf eine namentliche Nennung verzichtet wird, den im Literaturverzeichnis genannten Quellen lassen sich Namen derer entnehmen, die wichtige Beiträge⁶ zum heutigen Stand des Wissens geleistet haben.

⁶ Die Häufigkeit der Namensnennung ist dabei ohne Bedeutung, da sie nur den Unterschied zwischen FuE-Vorhaben und anlagenspezifischen Vorhaben widerspiegelt.

Literatur

- [ARE 22] Arendt, J.; Freyer, D.; Gruner, M.; Kudla, W: MgO-S³
In situ testing of magnesia shotcrete for drift-sealing elements in rock salt formations, TUABF, 12th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, & Operation, Braunschweig (Germany), 6th – 9th September, 2022
- [BAU 23] Bauermeister, J.; Langefeld, O.; Schieweg, A.; Raebiger, L.; Abel, P. Viertel, T.; Flemming, J.; Noorhan, W.; Ley, S.; Glaubach, U.; Wilsnack, T.; Müller-Hoeppe, N.; Hussein, A., Fischer, T.; Lack, D.; Schicht, T.; Brüning, M.; Kulenkampff, J.: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches, Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, in situ-Versuche (STROEFUN III), FKZ 02E11748A und 02E11748B, Schlussbericht, Hauptband, TU Clausthal – Institut für Bergbau, Clausthal-Zellerfeld, 2023
- [BFS 07] Mauke, R.; Laske, D.: Stilllegung ERAM – Verfüllen von Strecken mit hohen Anforderungen, Bauzustände für horizontale Strecken (Ergänzende Untersuchungen zum Nachweis der Rissbeschränkung im Salzbeton) und Nachweiskonzept für das südliche Wetterrolloch, Bundesamt für Strahlenschutz, P 255, 2007
- [BMI 83] Bundesministerium des Innern: Sicherheitskriterien für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in einem Bergwerk vom 20. April 1983, GMBI. 1983, Nr. 13, S. 220
- [BMU 10] Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle; Stand 30. September 2010
- [BMU 20] Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Verordnung über Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (Endlagersicherheitsanforderungsverordnung – EndlSiAnfV), Ausfertigungsdatum 06.10.2020, BGBl. I S. 2094

- [BOR 02] Bornemann, O., Behlau, J., Mingerzahn, G.: Projekt Gorleben, Geologische Bearbeitung der Erkundungssohle (Geologie, Mineralogie, Geochemie) 2. Geologische Fachberichte (Geologische Schnitte zur untertägigen Erkundung). 9G4121100000, 11813/02, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR): Hannover, 25. Juni 2002.
- [DAF 96] DAfStb - Deutscher Ausschuss für Stahlbeton: Richtlinie „Betonbau beim Umgang mit wassergefährdenden Stoffen“, 1996
- [DAF 97] DAfStb - Deutscher Ausschuss für Stahlbeton: Sicherheitskonzept für Bauten des Umweltschutzes, Heft 481, Beuth Verlag Berlin, Wien, Zürich, 1997
- [DBE 04] Müller-Hoeppe, N.; Polster, M.: Verfüllen von Strecken mit hohen Anforderungen - Konzeptplanung und Nachweisführung, KZL/9M/22310111/AJ/GH/BZ/0056/00, Stand 28.06.2004
- [DBE 12] Bauer, J.; Müller-Hoeppe, N.; Polster, M.; Schröpfer, T.: In situ-Versuch „Abdichtbauwerk im Steinsalz“ – Abschlussbericht, Stand 04.10. 2012; DBE-KZL: 9M/12YEA25/BE/BL/0001/01, Dok.-ID. 11591034 (unveröffentlicht)
- [DRO 92] Droste, J., Wallmüller, R.: Ingenieurgeologische Kartierung des Dammbauversuchsfeldes auf der 945-m-Sohle der Schachtanlage Asse II, GSF – IfT, Mai 1992
- [ESK 13] Entsorgungskommission: Langzeitsicherheitsnachweis für das Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM), Stellungnahme, 31.01.2013
- [ENG 88] Engelmann, H. J., Fischer, H., Hänsel, W., Wallner, M.: Dams as Sealing Systems in Rock Salt Formations – Test Dam Construction, WM'88, Tucson, AZ, Vol. 1, p. 283-287
- [ENG 91] Engelmann, H.J.: Entwicklung von Dammbauwerken für ein Endlager im Salzgestein In: Dammbau im Salzgebirge, Vorträge zur Informationsveranstaltung am 5. und 6.12.1990 in Peine, DBE, Oktober 1991

- [FIS 91] Fischer, H.: Entwicklung des Versuchsdammbauwerkes von der Konzeption zur berg- und bautechnischen Realisierung. In: Dammbau im Salzgebirge Vorträge zur Informationsveranstaltung am 5. und 6.12.1990 in Peine, DBE, Oktober 1991
- [FÖR 06] Förster, B.; Kappei, G.; Lommerzheim, A.: Closure Concept for the Asse II salt mine (N-Germany), SMRI, 2006
- [FRE 11] Freyer, D.: Sorel cement as geotechnical barrier in salt formations, Proc. 2nd International workshop on Actinide Brine Chemistry in a Salt-Based Repository, 7th-8th November 2011, Karlsruhe, 2011
- [FRE 19] Daniela Freyer, D.; Gruner, M.; Popp, T.; Salzer, K.; Rölke, C.: MgO shotcrete for engineered barrier systems in salt formations - in situ tests with inflow of MgCl₂ bearing solution (R&D project MgO-SEAL) 10th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, & Operation, Rapid City, SD, USA, May 28-30, 2019
- [GLÄ 05] F. Gläß, F.; Mauke, R.; Eilers, G.; Preuss, J.; Schmidt, H; Lerch, C.; Müller-Hoeppe, N.: INVESTIGATION OF A SALT-CONCRETE SEAL IN THE ASSE SALT MINE, WM-5233, Proc. WM'05 Conference, February 27-March 3, 2005, Tucson, AZ , 2005
- [GRS 11] Mrugalla, S.: Geowissenschaftliche Langzeitprognose. Bericht zum Arbeitspaket 2, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-275, ISBN 978-3-939355-51-9, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, Juli 2011
- [GRS 12a] Mönig, J., Buhmann, D., Rübél, A., Wolf, J., Baltés, B., Fischer-Appelt, K.: Sicherheits- und Nachweiskonzept. Bericht zum Arbeitspaket 4, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-277, ISBN: 978-3-939355-53-3, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012

- [GRS 12b] Beuth, T., Bracke, G., Buhmann, D., Dresbach, C., Keller, S., Krone, J., Lommerzheim, A., Mönig, J., Mrugalla, S., Rübel, A., Wolf, J.: Szenari-entwicklung: Methodik und Anwendung. Bericht zum Arbeitspaket 8, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-284, ISBN 978-3-939355-60-1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012
- [GRS 12c] Kock, I., Eickemeier, R., Frieling, G., Heusermann, S., Knauth, M., Minkley, W., Navarro, M., Nipp, H.-K., Vogel, P.: Integritätsanalyse der geologischen Barriere. Bericht zum Arbeitspaket 9.1, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-286, ISBN: 978-3-939355-62-5, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012
- [GRS 12d] Müller-Hoeppe, N., Buhmann, D., Czaikowski, O., Engelhardt, H.J., Herbert, H.-J., Lerch, C., Linkamp, M., Wieczorek, K., Xie, M.: Integrität geotechnischer Barrieren – Teil 1: Vorbemessung. Bericht zum Arbeitspaket 9.2, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-287, ISBN: 978-3-939355-63-2, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, (GRS) mbH: Köln, 2012
- [GRS 12e] Müller-Hoeppe, N., Breustedt, M., Czaikowski, O., Wieczorek, K., Wolf, J.: Integrität geotechnischer Barrieren – Teil 2: Vertiefte Nachweisführung. Bericht zum Arbeitspaket 9.2, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-288, ISBN: 978-3-939355-64-9, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012
- [GRS 13] Fischer-Appelt, K.; Baltés, B.; Buhmann, D.; Larue, J.; Mönig, J.: Synthesebericht für die VSG, Bericht zum Arbeitspaket 13, GRS-290, ISBN 978-3-939355-66-3, März 2013
- [GRU 23] Gruner, M.; Kudla, W.; Arendt, J.; Freyer, D.; Kulenkampff, J.; Effner, U.; Lüdeling, C.; Müller, B.; Paschke, I.; Popp, T.; Wilsnack, T.: MgO-S³: MgO-Spritzbeton für Streckenschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz, Abschlussbericht, TUBAF, Freiberg, 2023

- [GUT 99] Gutsch, A.-W.: Stoffeigenschaften jungen Betons – Versuche und Modelle, DAfStb, Heft 495, Beuth Verlag, Berlin, 1999
- [HER 05] Herbert, H.-J.; Becker, D.; Hagemann, S.; Meyer Th.; Noseck, U.; Rübél, A. Mauke, R.; Wollrath, J.: Alteration of Non-Metallic Barriers and Evolution of Solution Chemistry in Salt Formations in Germany, Engineered Barrier Systems (EBS) in the Context of the Entire Safety Case, Process Issues; Workshop Proc.; Las Vegas, US, 14-17 September 2004, OECD/NEA, 2005
- [HEY 15] Heydorn, M.; Teichmann, L.; Schneefuß, J.; Meyer, T.: Schachtanlage Asse II, Anwendungsversuch Pilotströmungsbarriere PSB A1, Freiberg, 28.04.2015
- [HEY 16] Heydorn, M.; Teichmann, L.; Meyer, T.: Schachtanlage Asse II, Anwendungsversuch Pilotströmungsbarriere PSB A1, Bergbau 4, S. 165-171, 2016
- [HEY 19] Heydorn, M.; Adelt, J.; Müller-Hoeppe, N.; Hofschlag, A.; Meyer, T.; von Borstel, L.: Industrial Planning and Construction of Drift Seals in the Asse Mine, Proc. 9th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation, Hanover, Sept. 10-11, 2018, BGR Report, 2019
- [KAM 12] Kamlot, P., Weise, D., Gärtner, G., Teichmann, L.: Drift sealing elements in the Asse II mine as a component of the emergency concept – assessment of the hydro-mechanical functionality, Taylor & Francis, London, The Mechanical Behavior of Salt: 7th Conference (SaltMech7): Paris, France, 2012
- [KNO 05] Knoll, P.: Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leichtlöslichen Salzgestein (Carnallit) für UTD/UTV. Abschlussbericht, GTS, FuE Vorhaben (FKZ 02 C 0942), 2005

- [KNO 10] Knoll, P., Finder, M., Kudla, W.: Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leichtlöslichen Salzgestein (Carnallit) für UTD/UTV, Teil 2: Erprobung von Funktionselementen. Zusammenfassender Abschlussbericht, FuE-Vorhaben (FKZ 02C1204), GTS, Teutschenthal 2010
- [KUD 20] Kudla, W.; Arendt, J., Freyer, D.; Grafe, F.; Gruner, M.; Müller, B.; Popp, T.; Wilsnack, T.: MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl₂-Lösung ("MgO-SEAL"), Abschlussbericht, TUBAF, Freiberg, 29.02.2020
- [MAU 07] Mauke, R.; Müller-Hoeppe, N.; Wollrath, J.: Planning, Assessment, and Construction of a Drift Seal in a Salt Repository – Overview of Investigations, Engineered Barrier Systems (EBS) in the Context of the Entire Safety Case, Process Issues; Workshop Proc.; Tokyo/Japan, 12-15 September 2006, OECD/NEA 2007
- [MAU 11] Mauke, R.; Kreienmeyer, M.; Manthee, F.; Schröpfer, T.: In situ-Versuch Abdichtbauwerk im Steinsalz, Vortrag 40. Geomechanik Kolloquium in Leipzig am 11.11.2011
- [MAU 12] Mauke, R.: In situ-Verification of a Drift Seal System in Rock Salt – Operating Experience and Preliminary Results, Proc. 2nd US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation, Peine, Nov. 9-10, 2011, Sandia Report SAND2012-1245C), 2012
- [MAU 13a] Mauke, R.: In Situ Investigation of the Morsleben Drift Seal – Operating Experience and Preliminary Results, Proc. 3rd US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation, Albuquerque, Oct. 9-11, 2012, Sandia Report SAND2013-1231P), 2013
- [MAU 13b] Mauke, R.: In Situ Investigation of the Morsleben Drift Seal – Operating Experience and Preliminary Results, Proc. 4th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation, Berlin, Sept. 17-18, 2013, Sandia Report SAND2013-10592P), 2013

- [MEY 08] Meyer, T., Teichmann, L.; Heydorn, M.: Geotechnische Messungen an einer Pilotströmungsbarriere, Messen in der Geotechnik, Fachseminar 23./24. Oktober 2008, Mitteilung IGB TUBS, Heft 87 (Hrsg: J. Stahlmann), Braunschweig, 2008
- [RÖH 14] Röhlig, K.-J.; Plischke, E.; Li, X.: Probabilistische Methoden als Hilfsmittel zur Bemessung von Verschlussbauwerken für ein Endlager im Salinar, Institut für Endlagerforschung, TU Clausthal, ISBN 978-3-945086-00-1, Clausthal- Zellerfeld, 2014
- [STO 91] Stockmann, N.; Beinlich A.; Flach, D.; Jockwer, N.; Klarr, K.; Krogmann, P.; Miehe, R.; Schmidt, M. W.; Schwägermann, H. F.; Walter, F.; Yaramanci, U.: Dammbau im Salzgebirge, Testplan, GSF-Bericht 35/91, Institut für Tieflagerung, 1991
- [STO 94] Stockmann, N.; Beinlich, A.; Droste, J.; Flach, D.; Gläß, F.; Krogmann, P.; Miehe, R.; Möller, J.; Schwägermann, F.; Wallmüller, R.; Walter, F.; Yaramanci, U.: Dammbau im Salzgebirge, Berichtszeitraum vom 01.07.1989 – 31.12.1992, Abschlussbericht Projektphase II, GSF-Bericht 18/94, Institut für Tieflagerung, 1994
- [WEB 16] Weber, J.; Wilsnack, T.; Langefeld, O.; Bollingerfehr, W.; Grafe, F.; Hesse, A.; Lack, D.; Müller-Hoeppe, N.: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung. Phase I: Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden, FZK 02E11253, TU Clausthal - Institut für Bergbau, Clausthal-Zellerfeld, 2016
- [WEN 18] Wenkel, S.; Bauermeister, J; Langefeld, O.: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches. Phase II: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, FKZ 02E11597, TU-Clausthal – Institut für Bergbau, Clausthal-Zellerfeld, 2018

- [WOL 19] Wollrath, J.; Mauke, R.; Kreienmeyer, M.; Carstensen, A.: Drift Seal Systems at the Morsleben Repository – Status of Investigations and Further Procedure, Proc. 9th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation, Hanover, Sept. 10-11, 2018, BGR Report, 2019
- [XIE 12] Xie, M., Herbert, H.-J.: Geochemical analysis of the sealing system. Bericht zum Arbeitspaket 9.1.2, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Braunschweig, Februar 2012

Großtechnische Versuche – Wissensstand zu den Materialeigenschaften Zement- und MgO-basierter Verschlussbaustoffe

¹ *TU Bergakademie Freiberg, Institut für Anorganische Chemie, Salz- und Mineralchemie*

Email: matthias.gruner@chemie.tu-freiberg.de

² *Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig*

Email: till.popp@ifg-leipzig.de

Einleitung - Großversuche als Teil des Nachweises der Funktionalität von Abdichtbauwerken

Wie auch in anderen Bereichen der Technik, wo das "Endprodukt" nicht mehr in ein Labor oder eine Werkstatt passt, sind für den Nachweis der Funktionalität Methoden zur Skalierung bzw. Übertragbarkeit erforderlich. Dafür hat sich in der Vergangenheit eine abgestufte Vorgehensweise bewährt, zunächst mit Laboruntersuchungen, in denen unter definierten Randbedingungen Einflussparameter auf Eigenschaften systematisch untersucht werden, im Übergang zu Technikumsversuchen, wo erste praktische Erfahrungen in der Umsetzung gewonnen werden, bis hin zu Großversuchen im Realmaßstab, bei denen gleichzeitig noch ein umfangreiches Monitoring, u.a. zu den Einflussfaktoren bzw. den resultierenden Eigenschaften betrieben wird.

Im Weiteren dienen diese Großversuche einmal zur Bestätigung des jeweils aktuellen Standes der Technik und zum anderen zu seiner Weiterentwicklung. Wie auch bei Autos, Flugzeugen und Schiffen sind für die weitere Produktentwicklung neue Prototypen und Erprobungen erforderlich. Jedes Bauwerk oder Produkt ist ein Abbild der im Entwurfsstadium aktuell geltenden Anforderungen. Darüber hinaus liefert diese Vorgehensweise eine Basis für modelltechnische Ansätze als Bestandteil der Nachweisverfahren zur Langzeitsicherheit, in denen mit geeigneten numerischen Tools beispielsweise Prozesse (u.a. thermisch, mechanisch und hydraulisch), u.a. in ihrer Skalenabhängigkeit sowie zur zeitlichen Prognose abgebildet werden können.

Für den langzeitsicheren Verschluss zukünftiger Endlager für radioaktive Abfälle sind als wesentlicher Teil des Sicherheitskonzepts Verschlussbauwerke (Schachtverschlüsse und Streckenverschlüsse) erforderlich. Für den Entwurf und die Errichtung dieser Verschlussbauwerke sind im Endeffekt realitätsnahe Großversuche unter in situ Bedingungen erforderlich. Die Nähe zur Realität betrifft nicht nur die Abmessungen (Querschnittfläche, äquivalenter Radius, Länge), sondern auch die angenommene Flüssigkeitsdruckbelastung. Gerade die gleichzeitige Annäherung an realistische Flüssigkeitsdrücke und realistische Druckgradienten ist problematisch. Die absolute Höhe der Flüssigkeitsdruckbelastung kann im Labor nachgebildet werden. Der Flüssigkeitsdruckgradient ist in diesem Maßstab allerdings unrealistisch hoch.

Ein direkter Übergang aus dem Labormaßstab zur Realität ist nicht möglich. Es sind Zwischenstufen in sogenannten halbtechnischen Maßstab erforderlich (siehe Tab. 1). Laboruntersuchungen sind aber eine notwendige Stufe zur Bestimmung von Materialparametern (Festigkeit, Verformungsverhalten, thermische Parameter, hydraulische Kenngrößen).

Wegen der Komplexität der Einflussparameter sind Laborversuche aber weiterhin ein wesentlicher Teil der den Großversuch begleitenden Untersuchungen. Sie dienen der Bestätigung, ob beispielsweise in der Realität die erforderlichen Materialparameter überhaupt erreicht werden konnten. Gleichzeitig wird eine Parameter-Bandbreite abgebildet.

Tab. 1 Übergang von Laboruntersuchungen bis zu in situ Großversuchen

Stufe	Ziel	Maßstab
<u>Laborversuche:</u>	<ul style="list-style-type: none"> • Bestimmung von Materialparametern • Qualitätskontrolle 	$D_{\max} = 150 \text{ mm}$ $m < 1 \text{ kg}$
<u>Halbtechnische Versuche (HTV):</u>	<ul style="list-style-type: none"> • Eignungstest (Dichtheitsprüfung) • Realistische Belastungen • Erprobung Messtechnik 	$D_{\max} = 0,3 \text{ bis } 1 \text{ m}$ $m_{\max} = 1 \text{ t}$ $\rho_{\max} = 10 \text{ MPa}$
<u>In situ Pilotversuche:</u>	<ul style="list-style-type: none"> • Wie HTV, nur mit realistischem Umfeld (Gebirge) 	Meist Bohrlochversuche
<u>In situ Großversuche:</u>	<ul style="list-style-type: none"> • Test des Gesamtsystems • Bautechnische Machbarkeit • Umfangreiche Instrumentierung • Nachuntersuchungen 	Maßstab 1:3 bis 1:1

Verschlussmaterialien: Zementbasierte Baustoffe und MgO-Beton

Verschlussmaterialien mit hoher Steifigkeit bestehen in der Regel aus einem Bindemittel und einem Zuschlagkorngerüst. Ist das Bindemittel aus Zement, sind unter salinaren Bedingungen die Besonderheiten einer möglichen Korrosion der Bindemittelphasen zu beachten. Nachfolgend wird das Augenmerk auf den MgO-Beton als Baustoff mit unterschiedlichen Rezepturen gelegt, die bereits in situ getestet wurden.

MgO-Spritzbeton

Der MgO-Spritzbeton (nur als 5-1-8-Rezepturtyp, d.h. mit der 5-1-8-Bindemittelphase neben Überschuss- MgO herstellbar) wurde ab 2005 im Rahmen des Projektes "CARLA II" (FKZ 02C0942, Laufzeit 01.11.2004 bis 30.06.2010) entwickelt. Vorteilhaft waren die aus der Entwicklung des MgO-Ortbetons bereits vorliegenden baustofftechnischen Erfahrungen in einem Großversuch (GV1) in der Grube Teutschenthal.

In der Zeit Februar bis September 2008 wurde in der Grube Teutschenthal erstmalig ein komplettes Dammbauwerk (GV2) aus MgO-Spritzbeton durch lagenweises Trockenspritzen (mittlere Schichtmächtigkeit: ca. 10 cm) errichtet. Durch diese Bauweise lag an der Gebirgskontur die Temperatur $< 40 \text{ }^\circ\text{C}$, womit eine thermische Beeinflussung (Dehydratation) des umgebenden Carnallitits vernachlässigbar war. Gleichzeitig waren auch die Temperaturgradienten im MgO-Spritzbeton sehr gering.

Im zeitlich (7 Jahre nach Bauwerkserstellung) nachfolgenden BMWi-Projekt "MgO-SEAL" (FKZ 02E11435, Laufzeit 01.10.2015 bis 30.04.2019) wurden am Referenzbauwerk GV2 in vier axial orientierten, schwach geneigten Bohrlöchern (L=3,65...6,00 m) Langzeitversuche zur Einwirkung salinärer Lösung auf den MgO-Spritzbeton durchgeführt. Durch die lange Einwirkzeit und die Durchführung der Versuche an einem technisch relevanten Bauwerk konnte mit hoher Aussagesicherheit der Nachweis erbracht werden, dass sich bei Einwirkung von NaCl-gesättigten Salzlösungen (MgCl₂-haltig und MgCl₂-frei) die Permeabilität des MgO-Betons mit der 5-1-8-Bindemittelphase (Rezeptur D4) mit der Einwirkzeit reduziert.

Von den vier Bohrlöchern hatten zwei (B38 und B39) eine relativ hohe Ausgangspermeabilität, was durch mehrere Betonierabschnittsgrenzen (BAG) bedingt ist, die praktisch senkrecht angeschnitten wurden. Dieser Befund ist durch Kamerabefahrungen bestätigt worden. Im Laufe der Flüssigkeitseinwirkung hat sich in diesen Bohrungen mit der Zeit die Flüssigkeitspermeabilität (Prüfdruck bis 4 ... 5 bar) auf das Niveau der Permeabilität des intakten MgO-Betons ($< 10^{-19} \text{ m}^2$) verringert. Dabei hat die Zusammensetzung der einwirkenden Lösung (reine gesättigte NaCl-Lösung oder Mg²⁺-haltige NaCl-Lösung) praktisch wenig Einfluss. Abb. 1 zeigt die Ergebnisse der Lösungspermeabilitätsmessungen für alle vier Bohrungen. In den Bohrungen B40 und B41 wurden keine BAG angeschnitten, so dass sie von Anfang an ein sehr niedriges Permeabilitätsniveau hatten.

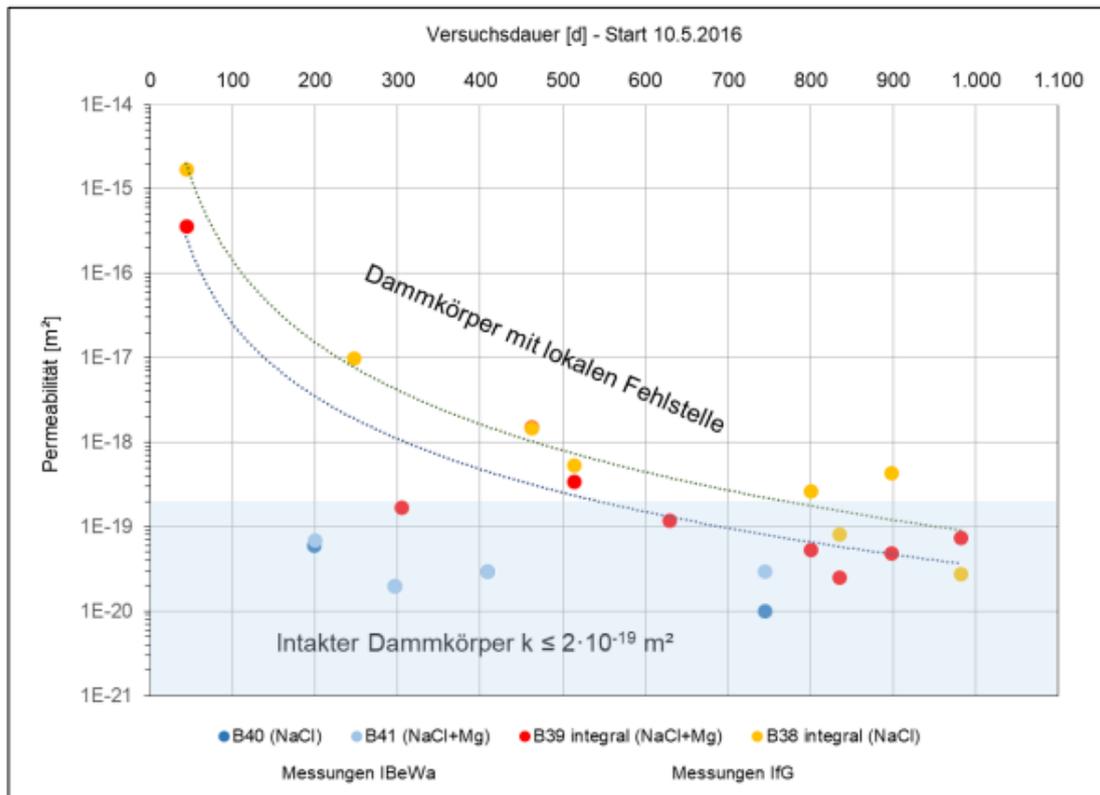


Abb. 1 Verringerung der Lösungspermeabilität des MgO-Spritzbetons (Bauwerk GV2) mit der Zeit [MgO-SEAL]

Die hochpermeablen Fehlstellen in den Bohrungen B38 und B39 werden mit der Zeit durch Reaktion der vorliegenden 5-1-8-Bindemittelphase und Rest-MgO mit der Zutrittslösung unter Bildung der 3-1-8-Phase (unter Volumenzunahme) abgedichtet – auch im Falle einer reinen NaCl-Lösung. Damit wird belegt, dass technische bedingte "kleine" Wegsamkeiten (Imperfektionen, BAG, kleine "Risse") sich selbst im MgO-Spritzbeton infolge Lösungseinwirkung abdichten können.

Weitere Untersuchungen wurden im Rahmen des BMWi-Projekts "MgO-S³" (FKZ 02E11769, Laufzeit 01.05.2019 bis 31.03.2022) durchgeführt, in dem ein selektiver Rückbau des rechten Teils des umliegenden Gebirges durchgeführt wurde und so ein Teil der Mantelfläche des Baukörpers GV2 aus MgO-Spritzbeton frei gelegt werden konnte.

Abb. 2 zeigt die Luftseite des Bauwerkes GV2 mit dem dann zum rechten Stoß seitlich aufgefahrenen Hohlraum, von dem die Mantelfläche des MgO-Spritzbetons freigelegt wurde. Dies ermöglichte eine Reihe von Nachuntersuchungen, wie:

- Detektion von Lösungszutritt im umliegenden Gebirge (hier Carnallit),

- Begutachtung der Kontaktfläche vom Gebirge zum MgO-Spritzbeton mit der Untersuchung der Verteilung der im Projekt CARLA II eingesetzten Injektionsmittel (abwechselnde Verpressebenen mit 2-Komponenten-Injektionsbitumen und mit Epoxidharz),
- In situ Ultraschalluntersuchungen der BAM (Fachbereich 8.2: Zerstörungsfreie Prüfmethode für das Bauwesen) zur Lokalisierung von Fehlstellen im MgO-Spritzbeton,
- Erstellen radialer Bohrungen in den MgO-Spritzbeton zur Gewinnung von Kernmaterial für mechanische und hydraulische Untersuchungen sowie für eine Kamerabefahrung und für Messungen der in situ Permeabilität.



Abb. 2 Luftseite des Bauwerkes GV2 mit dem seitlich aufgefahrenen Hohlraum zum Freilegen der Mantelfläche aus MgO-Spritzbeton [MgO-S³]

Die Permeabilitätsmessungen an den gewonnenen Bohrkernen und im Bohrloch (in situ) bestätigen die durch Lösungseinwirkung mögliche "Selbstabdichtung" des MgO-Spritzbetons.

Die gewonnenen Ergebnisse zeigen, dass der MgO-Beton (Rezeptur D4, als Spritzbeton, aber auch als Ortbeton) aufgrund seines Phasenbestandes (5-1-8-Bindemittelphase mit Überschuss-MgO) bei Lösungszutritt seine als Porosität beschreibbaren strukturellen Hohlräume verringert und es so zu einer Abnahme der Permeabilität mit der Zeit kommt. Die Ursache für die Verringerung der Porosität ist die Volumenzunahme des Reaktionsproduktes (3-1-8-Bindemittelphase) aufgrund der Lösungseinwirkung. Die 3-1-8-Bindemittelphase ist ein langzeitbeständiges Umwandlungsprodukt (Einzelheiten siehe Beiträge von I. Paschke, M. Pannach und Mitautoren "Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil I: Baustoffrezepturtypen und deren Eigenschaften; Teil II: Thermodynamische Berechnung der Beständigkeit im Wirtsgestein Salz" in diesem Heft).

Eine modelltechnische Beschreibung dieses Vorganges kann nicht durch einen Korrosionsprozess (Zunahme der Porosität durch Lösevorgänge) beschrieben werden, sondern erfordert eine quantitative Beschreibung der Abnahme des Hohlraumvolumens (Abnahme der Porosität oder von Rissweiten) in den Rechenmodellen. Weitere Vorschläge sind im Abschlussbericht des Projekts MgO-SEAL [MgO-SEAL] enthalten.

MgO-Ortbeton C3

Die Rezeptur des MgO-Ortbetons C3 ist so eingestellt, dass sich mit der Zeit die langzeitstabile 3-1-8-Bindemittelphase ausbildet (Einzelheiten siehe Beitrag von I. Paschke und Mitautoren "Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil I: Baustoffrezepturtypen und deren Eigenschaften" in diesem Heft). Die sekundäre Kristallisation der 3-1-8-Bindemittelphase aus der primär gebildeten 5-1-8-Bindemittelphase und rezepturbedingter Restporenlösung erfolgt mit Volumenzunahme. Dies führt bei Einspannung des Baukörpers zu einem Expansionsdruck, der im MgO-Beton oder an seiner Kontur zum Gebirge gemessen werden kann.

Im FuE-Projekt "ELSA – Phase 2" (Verbundprojekt der TU Bergakademie Freiberg und der BGE TECHNOLOGY GmbH – FKZ 02E11193A/B, Laufzeit 01.05.2013 bis 31.08.2020) wurden zwei in situ Großbohrlochversuche im Steinsalz mit dieser Baustoffrezeptur durchgeführt. Der GBLV1 mit einem Durchmesser von ca. 1 m und einer Länge von ca. 2,1 m wurde in der Grube Sondershausen (GSES mbH) durchgeführt. Nach der Bestätigung der ersten Ergebnisse wurde ein größer dimensionierter (Durchmesser 1,3 m, Länge 3,5 m) und umfangreicher instrumentierter Großbohrlochversuch GBLV2 in der Grube Teutschenthal (GTS GmbH & Co. KG) errichtet. An diesem GBLV2 wurden

Messungen der effektiven Permeabilität des Gesamtsystems aus Pfropfen und dem umliegenden Steinsalz mit Gas und Lösung durchgeführt.

Die Messungen der radialen Kontaktdrücke und weitere begleitende Messungen der effektiven Lösungspermeabilität des Gesamtsystems werden im aktuell laufenden FuE-Projekt "MgO-C3" (FKZ 02E12072A/B, Laufzeit 01.12.2022 bis 31.11.2025) bis Ende 2025 fortgesetzt.

Abb. 3 zeigt eine Abhängigkeit der effektiven Permeabilität des Gesamtsystems GBLV2 aus dem MgO-Ortbeton C3 von dem zum gleichen Zeitpunkt gemessenen radialen Kontaktdruck. Der Rückgang der effektiven Permeabilität (letzter Wert der effektiven Lösungspermeabilität am 19.06.2020) mit Zunahme des radialen Kontaktdruckes ist nachvollziehbar. Mit zunehmenden Kontaktdruck wird das System dichter. Aufgrund des relativ schnell sich entwickelnden autogenen (ohne äußere Lösungseinwirkung) Kontaktdruckes kann – in Abhängigkeit der Randbedingungen – eine schnell wirksame Abdichtung der Kontaktzone zum Gebirge bewirkt werden.

Da die effektive Permeabilität des Gesamtsystems geringer ist als die Permeabilität des Baustoffs (siehe Abb. 3) kann vermutet werden, dass durch den relativ hohen Kontaktdruck die Permeabilität des umliegenden Steinsalzes (ALZ) so verringert wird, dass eine Umströmung sehr gering ist.

Den letzten Stand der Messwerte (April 2023) zeigt Abb. 4 nach nunmehr 4 Jahren und reichlich 4 Monaten. Im Gesamtbild ist für den radialen Kontaktdruck (Sensoren S2, S4) nach einer einjährigen Aufbauphase (bis 300-400 Tage nach Betonage) über eine weitere knapp einjährige Plateauphase ein beginnender Rückgang nach ca. 2 Jahren zu verzeichnen. Dieser Rückgang hat nach aktuell 4,4 Jahren jedoch keinesfalls den Ausgangswert erreicht, sondern liegt immer noch bei etwa 4,0 MPa im Vergleich zur ersten Plateauphase mit 6 MPa (jeweils untere Messebene).

Aussagen über den weiteren Kontaktdruckverlauf sind jetzt noch nicht möglich, auch wenn es scheint, dass sich die Werte asymptotisch einer zweiten Plateauphase bei ca. 3 MPa nähern. Deshalb wird im Rahmen des Projekts "MgO-C3" die Druckentwicklung weiterverfolgt. Weiterhin werden in einem begleitenden Labormonitoringprogramm Messungen zur Expansionsdruckentwicklung in speziellen Druckmesszellen durchgeführt.

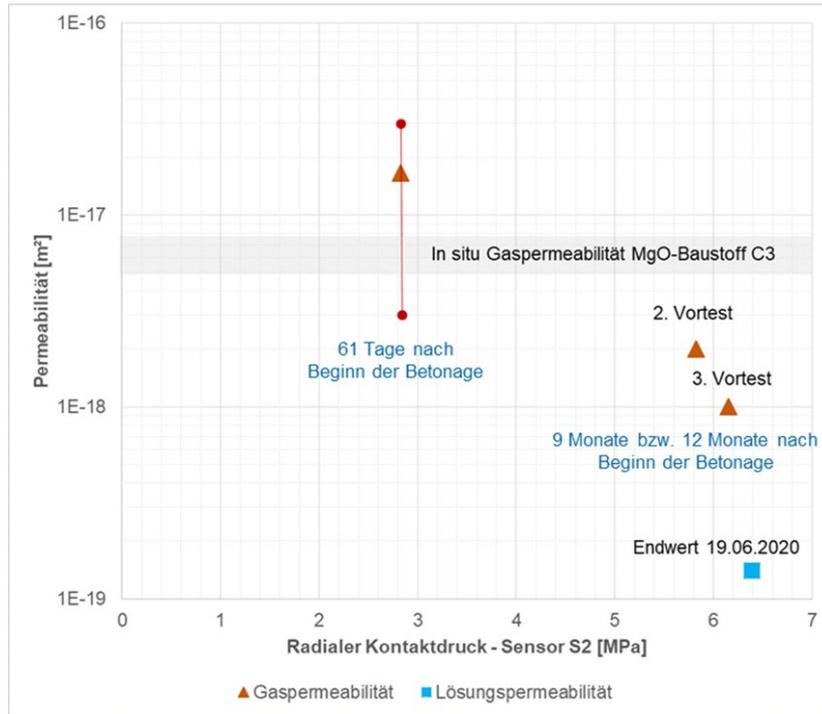


Abb. 3 Abhängigkeit der effektiven Permeabilität des Gesamtsystems GBLV2 vom radialen Kontaktdruck zum gleichen Zeitraum (letzter Stand: 50. Geomechanik-Kolloquium – 20. Mai 2022 in Sondershausen)

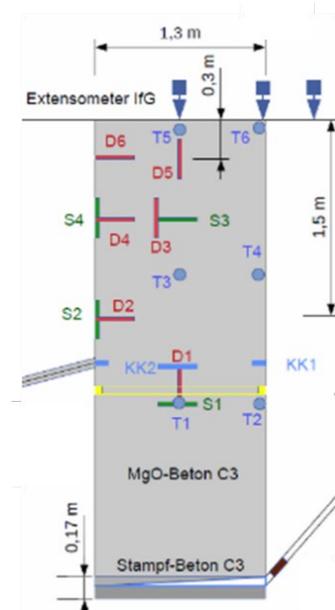
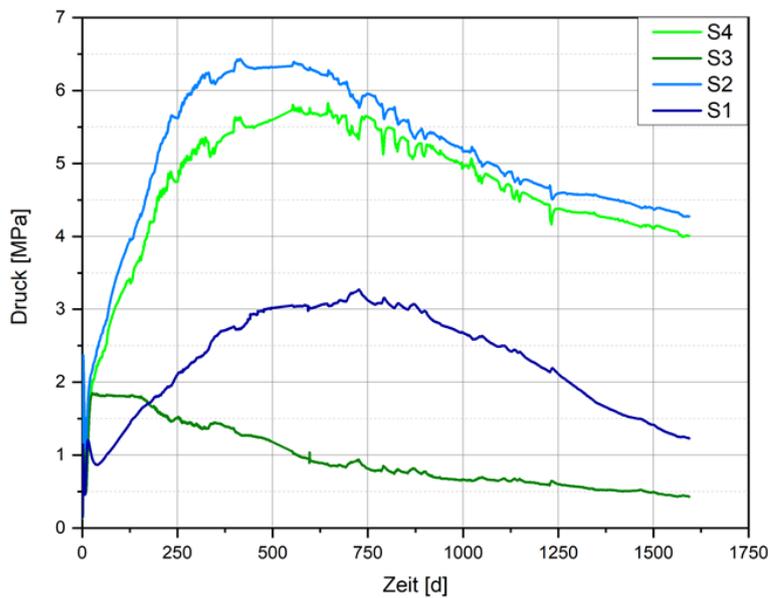


Abb. 4 Verlauf des radialen (S2, S4) und axialen (S1, S3) Drucks im GBLV2 (Stand 25.04.2023)

Hydraulische Wirksamkeit

Bewertungsansatz Grenzvolumenstrom

Ein grundlegender Aspekt der Verwendung der Ergebnisse von in situ Großversuchen ist die Übertragbarkeit zur Realität (Schachtverschlüsse, Streckenverschlüsse), insbesondere die Bewertung der "Dichtheit". Im FuE-Vorhaben ELSA wurde die "Dichtheit" wie folgt definiert: "Spezifizierung des hydraulischen Widerstandes im Dichtelement sowie in der Kontakt- und Auflockerungszone". Dies basiert auf der Erkenntnis, dass in Fließrichtung in einer Parallelschaltung aus Dichtelement und umliegenden Gebirge das Element mit dem niedrigsten hydraulischen Widerstand bzw. der höchsten Permeabilität das Verhalten des Gesamtsystems bestimmt.

Praxisnaher ist eine Bewertung nach dem resultierendem Volumenstrom, in dem die Lösungspemeabilität, der realistische Druckgradient und die durchströmte Querschnittsfläche eingehen. In diesem Fall lässt sich ein zulässiger Volumenstrom ableiten. So wurde für die zukünftigen Schachtverschlüsse des ERAM die "Dichtheit" durch einen Grenzvolumenstrom von $< 2 \text{ m}^3/\text{a}$ definiert [Rauche et al.].

Dieser Grenzvolumenstrom leitet sich aus dem Begriff der "technischen Dichtheit" ab, der sich an der Verdunstungsrate orientiert. Die Verdunstung liegt größenordnungsmäßig bei $0,7$ bis $0,9 \text{ m}^3/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$. Bei abzudichtenden Querschnitten von 10 m^2 bis 40 m^2 entspricht das Volumenströmen von $7 \text{ m}^3/\text{a}$ bis $36 \text{ m}^3/\text{a}$. Ein Grenzvolumenstrom für die technische Dichtheit sollte nicht über diesem Wertebereich liegen. Volumenströme unter $2 \text{ m}^3/\text{a}$ bieten somit eine entsprechende Sicherheit. Die Festlegung absoluter Grenzkriterien (Volumenstrom = "0") ist wenig sinnvoll.

Je nach Höhe der Umströmung (Teilvolumenstrom über die Kontaktzone und Auflockerungszone des Gebirges) sind zulässige Volumenströme $< 2 \text{ m}^3/\text{a}$ nicht immer an jedem Standort erreichbar oder erfordern relativ große Längen der Dichtelemente.

Für einen Vergleich der Ergebnisse unterschiedlicher Großversuche in unterschiedlichen Dimensionen ist es ratsam, dem im Versuch über längere Zeiträume gemessenen eintretenden Volumenstrom auf die Querschnittsfläche des Dichtelementes zu normieren. Den spezifischen Volumenstrom unterschiedlicher Großversuche zeigt Abb. 5. Darin sind die Ergebnisse der Flüssigkeitsdruckbelastung bei konstanten Druckphasen für folgende Großversuche im Steinsalz verglichen:

- Schachtverschluss Salzdetfurth: Bohrschachtversuch, kreisrunder Querschnitt, $D = 2,5 \text{ m}$. Da aus der zentralen Druckkammer gleichzeitig (Tandembetrieb) zwei Dichtelemente aus binärem Bentonitgemisch (Briketts mit Granulat) belastet wurden, beträgt die wirksame Querschnittfläche $9,82 \text{ m}^2$. Mit der Zeit verringert sich der spezifische Volumenstrom. Bei 4 MPa Flüssigkeitsdruck nähert sich der spezifische Volumenstrom asymptotisch ca. $0,1 \text{ m}^3/(\text{a}\cdot\text{m}^2)$, bei 7 MPa Flüssigkeitsdruck ca. $0,2 \text{ m}^3/(\text{a}\cdot\text{m}^2)$ [Sitz et al.].
- Streckenverschluss Sondershausen: Dichtelement aus Bentonitformsteinen, rechteckiger Querschnitt $3,2 \text{ m} \cdot 3,5 \text{ m} = 11,2 \text{ m}^2$. Mit der Zeit verringert sich bei geringen Flüssigkeitsdrücken der spezifische Volumenstrom. Allerdings steigt der sich nach langer Zeit prognostizierte spezifische Volumenstrom schon bei geringer Flüssigkeitsdruckerhöhung (hier von $0,5 \text{ MPa}$ auf $1,5 \text{ MPa}$) stark an. Bei weiterer Druckerhöhung auf 4 MPa steigt der spezifische Volumenstrom von $3,7 \text{ m}^3/(\text{a}\cdot\text{m}^2)$ nach kurzer Zeit von 8 Tagen auf $6,3 \text{ m}^3/(\text{a}\cdot\text{m}^2)$. Diese Werte sind in Abb. 5 nicht dargestellt, da sie für die vorliegende Betrachtung inakzeptabel sind. Im weiteren Verlauf des Versuches hat der Streckenverschluss mit einer starken Umströmung und nicht praktikablen Leckraten versagt [Sitz et al.].
- GBLV2 aus MgO-Ortbeton C3: kreisrunder Querschnitt mit $D = 1,3 \text{ m}$, wirksame Querschnittfläche $1,33 \text{ m}^2$. Der für den angegebenen Endwert von $0,14 \text{ m}^3/(\text{a}\cdot\text{m}^2)$ maßgebende Flüssigkeitsdruck betrug 2 MPa .

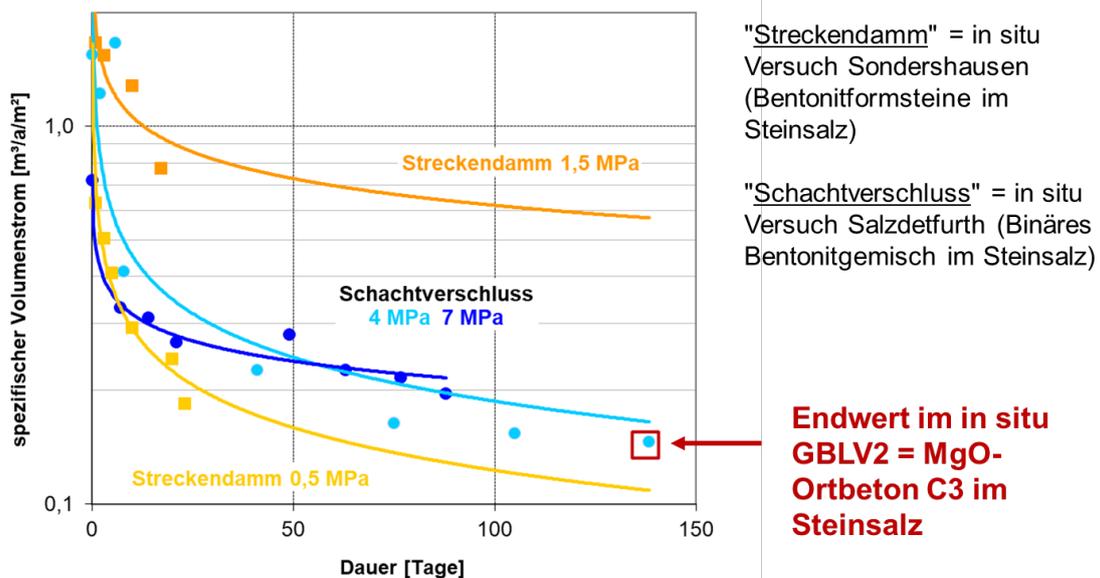


Abb. 5 Vergleichbarkeit unterschiedlicher in situ Versuche durch einen spezifischen (eingehenden) Volumenstrom (normiert zur Querschnittfläche)

Geht man von einem spezifischen Volumenstrom von $0,1 \text{ m}^3/(\text{a}\cdot\text{m}^2)$ aus, resultieren bei einer Skalierung auf realistische Schächte daraus eintretende Flüssigkeitsvolumenströme zwischen $2,8 \text{ m}^3/\text{a}$ (bei $D = 6 \text{ m}$) und $5 \text{ m}^3/\text{a}$ (bei $D = 8 \text{ m}$). Dies ist größer als der für eine Bemessung zugrunde zu legende durchgehende Grenzvolumenstrom von $2 \text{ m}^3/\text{a}$. Allerdings muss hier berücksichtigt werden, dass sich der Grenzvolumenstrom auf stationäre Bedingungen nach einem Durchfluss bezieht. Der im Versuch, auch nach relativ langen Versuchszeiten messbare instationäre eingehende Volumenstrom ist sehr konservativ.

Da die bisherigen Ergebnisse zum Abdichtverhalten des MgO-Betons C3 sehr hoffnungsvoll sind, erscheint es sinnvoll, die Vorteile beider Rezepturvarianten (C3 und D4) konzeptionell zu verknüpfen.

Der MgO-Beton C3 (mit 3-1-8-Bindemittelphase) ermöglicht durch seine relativ schnelle autogene (ohne äußeren Lösungseinfluss) Kontaktdruckentwicklung eine schnell wirksame Abdichtung des Kontaktbereiches. Möglicherweise ist somit keine Kontaktbereichsinjektion erforderlich.

Der MgO-Beton D4 (mit 5-1-8-Bindemittelphase und Überschuss-MgO) ermöglicht bei Lösungszutritt eine aktive Selbstabdichtung möglicher Wegsamkeiten, die mit der Zeit zu einer Verringerung der Permeabilität auf den Wert des intakten Baustoffs führt.

Optimierungsansatz der Dichtwirkung durch Diversität

Eine Kombination beider oben beschriebenen MgO-Betonrezepturtypen zeigt die in Abb 6 dargestellte Möglichkeit eines Pfropfens aus MgO-Beton D4 mit einer schnell wirksamen Kerndichtung aus MgO-Beton C3. Da die Kerndichtung infolge der Positionierung zwischen den Widerlagern aus MgO-Beton D4 sich nicht ausdehnen kann, ist nicht mit einer schnellen Verringerung des Kontaktdruckes zu rechnen. Wie lange der Kontaktdruck in welcher Höhe erhalten bleibt und welche Rolle dabei das Zuschlaggerüst des MgO-Betons C3 spielt, ist Gegenstand aktueller Untersuchungen.

Eine weitere Option ist die Positionierung eines Elementes aus Asphalt im Zentrum der Kerndichtung aus MgO-Betons C3. Durch den Expansionsdruck des MgO-Betons C3 wird auf das Asphaltelement ein vorteilhafter Druckspannungszustand erzeugt, der dessen Dichtverhalten verbessert.

Die beschriebenen Möglichkeiten lassen sich in Schachtverschlüssen in Ortbetonbauweise im Salinar relativ leicht realisieren. Für Streckenverschlüsse kann der D4 (5-1-8-Rezepturtyp) sowohl als Ort- wie auch als Spritzbeton und der MgO-Beton C3 (3-1-8-Rezepturtyp) als Ortbeton (nicht als Spritzbeton umsetzbar) eingebracht werden.

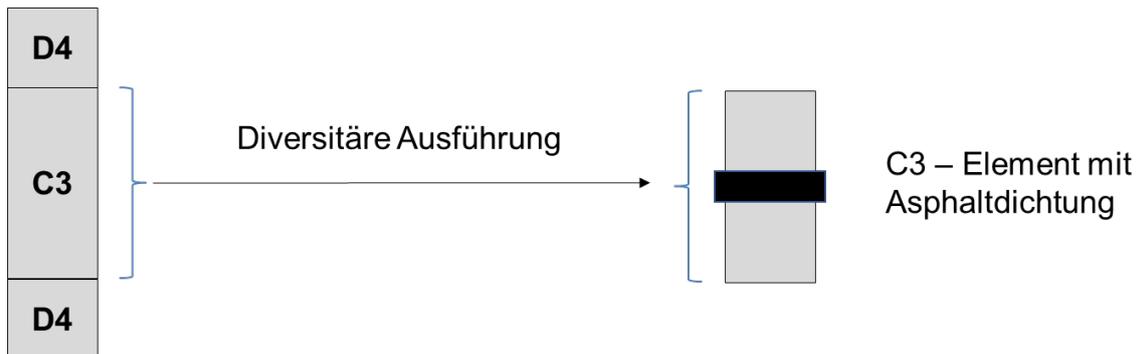


Abb. 6 Einsatz des MgO-Ortbetons C3 (3-1-8-Rezepturtyp) in diversitären Ausführungen von Schachtverschlüsselementen (z.B. mit MgO-Beton vom 5-1-8-Rezepturtyp oder Asphalt)

Schlussfolgerungen

Es ergeben als wesentliche Kernaussagen:

- Die vorliegenden Demonstrationsbauwerke belegen, dass es mittels der vorhandenen MgO-Baustoffrezepturen möglich ist, nachweislich langzeitsichere und hinreichend dichte Abdichtungen für Schächte oder Strecken im Wirtsgestein Salz zu bauen.
- Die integrale Dichtheit des Bauwerks hängt vor allem von einer möglichen Umströmung über die ALZ bzw. die Kontaktzone ab, während der Baustoff insgesamt sehr niedrig permeabel bis undurchlässig ist.
- Ein Zutritt von NaCl-gesättigter, $MgCl_2$ -haltiger Lösung in ein MgO-Spritzbetonbauwerk (5-1-8-Rezeptur) führt zur Selbstabdichtung.
- Der Einbauzustand (initiale Dichtheit) verbessert sich im kriechfähigen Salzgebirge mit zunehmender Einspannung: Abnahme der Permeabilität, (1) über die Verringerung der Wirksamkeit der ALZ und (2) die Einspannung des Baustoffs.

- Die Wirksamkeit eines Bauwerks lässt sich realitätsnah über den spezifischen Grenzvolumenstrom (und nicht allein mit der Permeabilität) beschreiben.
- Diversität als Kombination unterschiedlicher Dichtbaustoffe, z.B. MgO-Beton mit Asphalt/Bitumen) und neue Konstruktionsprinzipien (z.B. expansiver MgO-C3-Baustoff für Schächte) erhöht (1) die frühe Wirksamkeit (Dichtheit) und (2) gewährleistet Langzeitbeständigkeit gegenüber salinaren Zutrittslösungen.

Auflösung verwendeter Akronyme

CARLA II	Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leichtlöslichen Salzgestein (Carnallit) für UTD/UTV. Teil 2: Erprobung von Funktionselementen
GV	Großversuch
MgO-SEAL	MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von $MgCl_2$ -Lösung
MgO-S ³	MgO-Spritzbeton für Streckenschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz
ELSA	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle
GBLV	Großbohrlochversuch
MgO-C3	MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar

Literatur

- [MgO-S³] Abschlussbericht zum FuE-Projekt MgO-S³: "MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz" vom 15.02.2023. FKZ: 02E11769A, TU Bergakademie Freiberg.
- [MgO-SEAL] Abschlussbericht zum Vorhaben MgO-SEAL: "MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl₂-Lösung" vom 29.02.2020. FKZ: 02E11435, TU Bergakademie Freiberg.
- [Rauche et al.] Rauche, H., Sitz, P., Lukas, V., Rumphorst, K., Lippmann, G., Wagner, K., Teichert, Th.: Nachweisführungen zur Langzeitstabilität, zur Tragfähigkeit und zur Gebrauchstauglichkeit der Schachtverschlüsse ERA Morsleben.
<https://www.bge.de/de/morsleben/wesentliche-unterlagen/weitere-verfahrens-und-planunterlagen/weitere-verfahrens-und-planunterlagen-stilllegungskonzept-nachweise/>
- [Sitz et al.] Sitz, P.; Gruner, M.; Rumphorst, K.: Verschlussbauwerke für Endlager und Untertagedeponien. In: 6. Projektstatusgespräch des Projektträgers des BMBF und BMWA für Wassertechnologie und Entsorgung, 27./28. Mai 2003, Wissenschaftliche Berichte FZKA-PTE Nr. 8, S. 135 – 150, - Karlsruhe, August 2003.

1.15

F. Schmidt-Döhl:

THC-Modellierung von zementbasierten Abdichtmaterialien und Verschlussbauwerken

Technische Universität Hamburg, Hamburg, Deutschland

Email: schmidt-doehl@tuhh.de

Zusammenfassung

Der Beitrag beschäftigt sich mit der gekoppelten Simulationsberechnung von thermischen Prozessen (T), Stofftransportprozessen (H) und chemischen Reaktionsprozessen (C). In geringem Maße wird auf die Kopplung mit mechanischen Modellen eingegangen (M). Die Motivation zur Entwicklung entsprechender Modelle, der grundsätzliche Aufbau, Details der einzelnen Teilmodelle und deren Zusammenwirken werden erläutert. Materialspezifische und materialunabhängige Eingangsgrößen werden beschrieben. Materialspezifische Eingangsgrößen sind in der Regel experimentell zu bestimmen. Materialunabhängige Eingangsgrößen können aus Datenbanken oder aus Erfahrungswerten entnommen werden. Auf die Weiterentwicklung deterministischer Modelle zu entsprechenden probabilistischen Modellen wird kurz eingegangen. Der Forschungsbedarf wird aufgezeigt. Schließlich wird beschrieben, wie die richtige Funktion von THC-Modellen nachgewiesen werden kann.

Allgemeines

„Rechnerische Simulationen werden dann angewandt, wenn man Fragestellungen und Probleme nicht mehr im Laborexperiment lösen kann oder will. Dies kann beispielsweise der Fall sein, wenn:“ (wörtliche Zitate aus Schmidt-Döhl, 2013)

- Prozesse „langsam sind und Laborexperimente daher“ sehr lange dauern, z.B. Korrosionsprozesse sehr dichter Materialien, wie sie in der Endlagersicherheitsforschung häufig betrachtet werden,
- „Prozesse zu schnell sind, um sie im Laborexperiment beobachten zu können“, z.B. Explosionen,
- „Prüfkörper zu groß sind, um sie im Labor prüfen zu können,“

- „Prozesse zu komplex sind, um sie rein experimentell durchschauen zu können“, z.B. weil vielfältige Wechselwirkungen auftreten,
- Ergebnisse im Laborexperiment nicht gemessen, aber in der Simulation berechnet werden können oder
- Computersimulation gegenüber einem Laborexperiment Kosten einsparen können, z.B. weil umfangreiche Parameterstudien im Computerexperiment schneller und kostengünstiger durchführbar sind als im Labor.

Man verlegt also ein“ reales Experiment in den Rechner. „Wenn man von wissensbasierten Systemen (Expertensystemen) absieht, beruhen rechnerische Simulationsverfahren darauf, einen mehr oder weniger komplexen, orts- und ggf. zeitabhängigen, physikalischen und/oder chemischen Prozess in Form von gekoppelten Gleichungen zu beschreiben und das sich ergebende Gleichungssystem numerisch zu lösen.“ Rechnerische Simulationsverfahren benötigen „materialspezifische, problemspezifische und weitere Eingangsgrößen.“ Bei der Anwendung eines ausgereiften Programms ist die Bestimmung dieser Eingangsgrößen häufig der aufwändigste Schritt. „Die Güte der Ergebnisse hängt davon ab:

- inwieweit die zugrundeliegenden physikalisch-chemischen Modelle die Realität abbilden können,
- von der Qualität der Algorithmen,
- der Qualität der Eingangsgrößen und nicht zuletzt
- von der Kompetenz des Anwenders.

Jede Nutzung eines komplexen rechnerischen Simulationsprogramms ohne Kenntnis der zugrundeliegenden Prozesse und Modelle birgt erhebliche Risiken. Voraussetzung für die Nutzung von rechnerischen Simulationsverfahren ist auch immer, dass die richtige Funktion des Simulationsverfahrens für den Anwendungsfall vorher nachgewiesen wurde.“ Darauf wird weiter unten näher eingegangen.

THC(M)-Modellierung

„Um die Leistungsfähigkeit von Simulationsverfahren für die“ Prognose des Verhaltens „von Bauteilen grob zu umreißen arbeitet man mit Abkürzungen für die miteinander gekoppelten Teilmodelle:“

- T Simulation thermischer Prozesse
- H Simulation von Stofftransportprozessen
- C Simulation chemischer Prozesse
- M Simulation mechanischer Prozesse

„Um Dauerhaftigkeitsfragestellungen zu simulieren, benötigt man zumindest ein THC-Modell, wenn“ Veränderungen mechanischer Größen sowie „Rissbildungen und ihre Rückkopplung auf die Dauerhaftigkeit mit einbezogen werden sollen auch ein THCM-Modell.“ Es ist fraglich, ob ein echtes THCM-Modell überhaupt existiert. Deshalb ist dieser Beitrag auch überschrieben mit THC-Modellierung. Verknüpfungen zur Simulation mechanischer Prozesse werden aber immer wieder anklingen. Die Dauerhaftigkeit eines Bauteils aus einem oder mehreren porösen Werkstoffen in einer bestimmten chemischen Umgebung „wird im Wesentlichen bestimmt durch:

- die Transportprozesse im Porensystem der beteiligten Werkstoffe,
- die ablaufenden chemischen Reaktionen,“
- die daraus resultierenden korrosiven Effekte, z.B. die Bildung korrodierter Bereiche mit verminderter Festigkeit, Querschnittsverlust, veränderten Transportparametern, Dehnungen, Rissbildungen oder Bewehrungskorrosion und
- die Veränderungen der Porosität und Porenstruktur durch die auftretenden chemischen Reaktionen in der korrodierten Randzone und deren Rückwirkung auf die Transportprozesse.

„Ein Modell das nicht nur spezifisch für einen bestimmten Schadensprozess ist, sondern im Prinzip allgemeingültig anwendbar ist, muss die oben beschriebenen Teilprozesse eines Korrosionsvorganges durch miteinander verknüpfte chemisch-physikalische Modelle beschreiben. Die Grundstruktur solcher Algorithmen ist“ in der folgenden Abbildung aufgezeigt, in dem auch die spezifischen Möglichkeiten der Software Transreac eingetragen sind, die vom Autor in den 1990er Jahren entwickelt wurde und seitdem von Frau Dr. Ellen Rigo, Herr Dr. Stephan Bruder, Frau Heike Heizmann, vom Autor u.a. weiterentwickelt worden ist. Entsprechende Modelle laufen auch unter dem Begriff reaktive Transportmodellierung oder Transport-Reaktions-Simulation.

Grundsätzlich läuft eine solche Simulation folgendermaßen ab. Das zu betrachtende System, d.h. das Bauteil und seine Umgebung wird örtlich diskretisiert, d.h. in Volumenelemente aufgeteilt. Den Volumenelementen werden Materialien zugeordnet, mit ihren materialspezifischen Eigenschaften, z.B. der chemischen Zusammensetzung. Die Anfangsbedingungen (Temperatur, Feuchte, Druck) werden festgelegt. Nach dem Start erfolgt zunächst eine Berechnung des Phasenbestandes an den einzelnen Volumenelementen. Dies ist der ortsabhängige Ausgangs-Phasenbestand des unkorrodierten Bauteils und seiner Umgebung. Dann erfolgt eine Berechnung der Transportprozesse während des Zeitschritts Δt . Aus der jetzt veränderten chemischen Zusammensetzung der einzelnen Volumenelemente oder auch einer veränderten Temperatur oder verändertem Druck folgt ein veränderter Phasenbestand, der wiederum mit Hilfe des Reaktionsmodells für jedes Volumenelement neu berechnet wird. Daraus folgt eine veränderte Porosität bzw. Porenstruktur, was veränderte Transportparameter nach sich zieht.

Anschließend werden wieder die Transportprozesse berechnet und dieser Vorgang wiederholt sich so lange, bis der gewünschte Endzeitpunkt erreicht ist. Währenddessen müssen auch ggf. auftretende korrosive Effekte berechnet und berücksichtigt werden. Schließlich kann eine solche zunächst deterministische Simulation zu einer probabilistischen erweitert werden, die in der Lage ist, bei Kenntnis der Streuung und statistischen Verteilung der Eingangsgrößen auch die Streuung der Ergebnisse zu berechnen. Dies kann z.B. über eine Monte Carlo Simulation erfolgen.

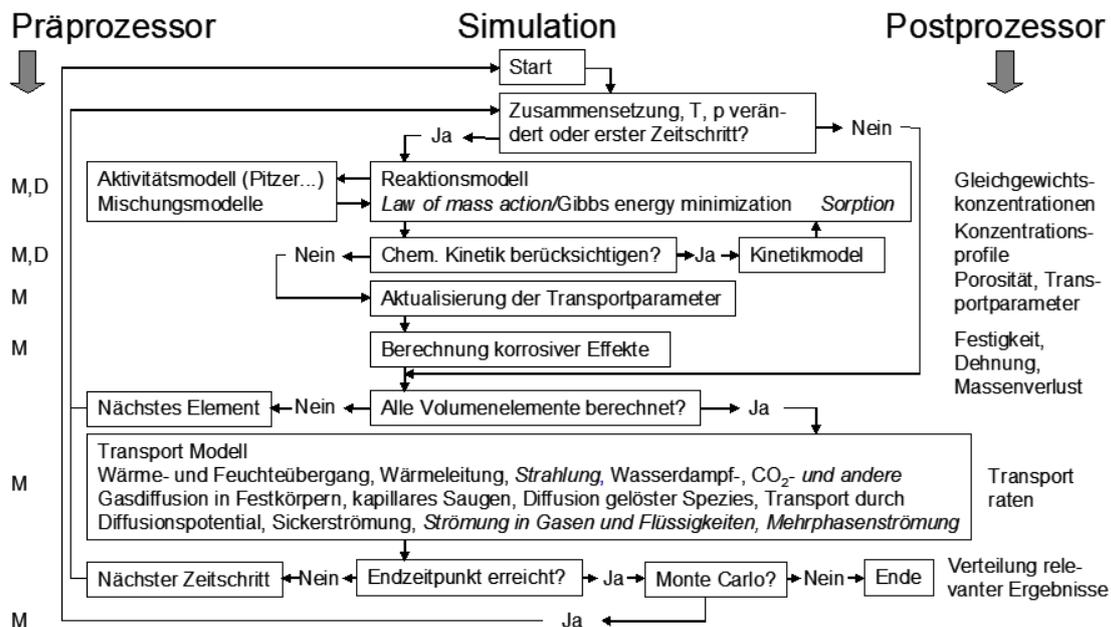


Abb. 1 Grundstruktur einer probabilistischen Transport-Reaktions-Simulation. Module in kursiv sind in Transreac nicht verwirklicht. M – materialabhängige Eingangsdaten, D –materialunabhängige Eingangsdaten. (Schmidt-Döhl, 2009)

Die Berechnung der Transportprozesse innerhalb solcher Simulationen kann grundsätzlich in ein, zwei oder drei Dimensionen erfolgen. Bei Verfahren zur Simulation des Wärme-, Feuchte- und Stofftransportes werden häufig Differenzenverfahren zur Lösung der zugrundeliegenden Gleichungssysteme eingesetzt, da man hier die Stärke der Finite-Elemente-Methoden, komplizierte Geometrien leicht abzubilden, in der Regel nicht benötigt. Bei der Simulation von gekoppelten Reaktions- und Transportprozessen kann es sogar günstig sein, die Transportprozesse mit dem einfachen Vorwärts-Differenzenverfahren zu berechnen. Ein solcher Algorithmus hat den Nachteil, dass bei diesem Verfahren nur kleine Zeitschrittweiten möglich sind, da während eines Zeitschrittes nur ein Transport von einem Volumenelement in das jeweilige Nachbarelement erfolgen kann. Dies ist hier aber von Vorteil. „Diese Eigenschaft des Verfahrens stellt auf sehr einfache Art und Weise sicher, dass der eventuelle Einbau von in der Porenflüssigkeit gelösten Teilchen oder des Lösungsmittels in eine feste Phase korrekt berechnet wird.“ (Schmidt-Döhl, 1996)

Bei Verfahren, die während eines Zeitschrittes ein Transport über alle Volumenelemente erlauben, kann dieses Zusammenwirken zwischen Transport und chemischen Reaktionen nur über Filtrationskoeffizienten o.ä. berücksichtigt werden, was die Berechnung wesentlich verkompliziert. Zu bemerken ist schließlich auch, dass alle verwendeten Algorithmen sehr stabil sein müssen, da sie während einer Simulation viele tausende Mal durchlaufen werden müssen, und dass entsprechende Simulationen erhebliche Rechenzeiten erfordern. Es ergibt sich allerdings auch die Möglichkeit der Parallelisierung. Im Folgenden werden die einzelnen Teilmodelle näher erläutert.

Simulation thermischer Prozesse

Für die Simulation von Korrosionsprozessen von Bauteilen ist es notwendig die folgenden Wärmetransportprozesse zu simulieren:

- Wärmeleitung. Benötigt wird die materialspezifische Wärmeleitfähigkeit.
- Wärmeübergang an den Bauteilgrenzen. Benötigt wird die jeweilige Wärmeübergangszahl, die sich additiv aus der konvektiven Wärmeübergangszahl (abhängig von den Strömungsverhältnissen an der Grenzfläche Festkörper-Fluid) und der Strahlungsübergangszahl (materialspezifisch) zusammensetzt.
- Im Falle von instationärem Wärmetransport muss die Wärmespeicherung berechnet werden. Dies erfordert die Berücksichtigung der materialspezifischen Wärmekapazität.

Die Tatsache, dass in porösen Werkstoffen, wozu auch Salzbeton und Sorelbeton gehören, eigentlich keine reine Wärmeleitung stattfindet, sondern ein „innerer“ Wärmeübergang, wird in der Regel vernachlässigt. Man tut so, als ob im porösen Werkstoff nur Wärmeleitung stattfindet und berücksichtigt die Übergangsprozesse an den Porenwänden in der jeweiligen Wärmeleitfähigkeit.

Insofern spielen der Wärmetransport durch Strahlung und Konvektion nur an Bauteilgrenzen eine Rolle und werden dort als Wärmeübergang berechnet. Der Wärmetransport in Flüssigkeiten und Gasen wird in der Regel vom konvektiven Wärmetransport dominiert und lässt sich nur mittels numerischer Strömungsmechanik berechnen. Die Simulation thermischer Prozesse in Bauteilen ist ein Teilgebiet der Bauphysik. Experimentelle Versuchstechniken, Werkstoffkenngrößen und physikalische Modelle können aus der bauphysikalischen wissenschaftlichen Literatur entnommen werden. In der Regel lassen sich thermische Prozesse von Bauteilen aus porösen Werkstoffen nur gekoppelt mit der Berechnung des Feuchte-transportes simulieren, da die Wärmeleitfähigkeit und die Wärmekapazität feuchteabhängig sind und Temperaturveränderungen auch zu Veränderungen des Feuchtezustandes eines Bauteils führen.

Simulation von Stofftransportprozessen

Für die Simulation von Korrosionsprozessen von Bauteilen ist es notwendig die folgenden Stofftransportprozesse zu simulieren:

- Wasserdampfdiffusion und andere Gasdiffusionsprozesse. Sie finden nur in ungesättigten porösen Bauteilen statt. Benötigt wird die jeweilige materialspezifische Gasdiffusionswiderstandszahl in einem Feuchtebereich, wo der Kapillartransport keine Rolle spielt. Im Falle von Wasserdampfdiffusion bedeutet dies, dass die Wasserdampfdiffusionswiderstandszahl im Trockenbereich benötigt wird.
- Kapillare Transportprozesse. Kapillartransport findet ebenfalls nur in ungesättigten porösen Bauteilen statt. Sie treten sowohl bei direktem Kontakt mit Lösungen auf (kapillares Saugen), als auch ohne direkten Kontakt (kapillare Weiterverteilung). Benötigt werden materialspezifische kapillare Transportkoeffizienten z.B. der Wasseraufnahmekoeffizient.
- Permeation (Sickerströmung). Sie führt zur Sättigung eines porösen Bauteils und findet auch im gesättigten Zustand statt. Benötigt werden materialspezifische Durchlässigkeitsbeiwerte.

- Feuchteübergang. Der Feuchteübergang spielt nur bei Trocknungsprozessen eine Rolle. Bei Befeuchtung sind Übergangsprozesse vernachlässigbar. Benötigt wird der von den Strömungsverhältnissen an der Grenzfläche Bauteil-Fluid abhängige Feuchteübergangskoeffizient.
- Bei Permeation und Kapillartransport werden nicht nur das Lösungsmittel, sondern auch die gelösten Stoffe mittransportiert. Dieser Transportprozess wird gerne als Huckepacktransport bezeichnet. Beim kapillaren Weiterverteilen endet der Huckepacktransport gelöster Spezies bereits bei größeren relativen Luftfeuchten als der Wassertransport selbst (s. Dissertation von M. Heidmann, 2013, S. 136).
- Diffusion gelöster Teilchen. Zur Berechnung benötigt werden vom Material und vom gelösten Stoff abhängige Diffusionskoeffizienten. Letztlich sind diese auch von der Konzentration abhängig, was aber meistens vernachlässigt wird.
- Da jedes Ion unterschiedlich schnell diffundiert, baut sich unweigerlich ein Diffusionspotential auf. Es sorgt dafür, dass schnelle Ionen abgebremst und langsame beschleunigt werden.
- Bei instationären Feuchtetransportprozessen ist die Feuchtespeicherung zu berechnen. Dafür wird die materialspezifische Feuchtespeicherfunktion benötigt, die aus der Sorptionsisotherme und der Saugspannungskurve ermittelt werden kann. Bei manchen Materialien reicht die Kenntnis der Sorptionsisotherme und der maximalen freien Wasseraufnahme aus.

Strömungsprozesse in Gasen und Flüssigkeit lassen sich wiederum nur mittels numerischer Strömungsmechanik berechnen. Die Berechnung von Feuchtetransportprozessen ist wiederum ein Teilgebiet der Bauphysik. Experimentelle Versuchstechniken, Werkstoffkenngrößen und physikalische Modelle können aus der bauphysikalischen wissenschaftlichen Literatur entnommen werden. Die Berechnung von Diffusionsprozessen gelöster Spezies unter Berücksichtigung des Einflusses des Diffusionspotentials ist Gegenstand des Nernst-Planck-Modells.

Simulation von chemischen Reaktionen

„Durch die Transportprozesse sowie veränderte Temperatur- oder Druckbedingungen werden chemische Reaktionen ausgelöst, die über ein Reaktionsmodell beschrieben werden müssen.“ Dafür gibt es grundsätzlich zwei Möglichkeiten. Man kann zum einen

GEM-Algorithmen benutzen (Gibbs Energy Minimization). Diese Algorithmen beruhen auf einer Optimierung der Gibbschen Energie des Systems. Sie erfordern als Eingangsgrößen speziesspezifische thermodynamische Standardgrößen, die Gibbsche Energie, die Standardbildungsenthalpie, die Koeffizienten zur Berechnung der Wärmekapazität und das molare Volumen. Es sind keine Vorkenntnisse über die ablaufenden Reaktionen erforderlich. Zum anderen kommen sogenannte Law of Mass Action Modelle zum Einsatz. Sie beruhen auf der Lösung von Gleichungssystemen, die aus den ablaufenden Reaktionen und ihren Gleichgewichtskonstanten aufgebaut werden. Diese Modelle erfordern also eine Vorkenntnis aller zu erwartenden Reaktionen, was sie weniger flexibel einsetzbar macht. „Um Redoxreaktionen simulieren zu können ist bei der Reaktionsmodellierung als Nebenbedingung, neben dem Erhalt der Masse der einzelnen chemischen Elemente, auch der Erhalt der Ladung sicherzustellen.“

Eine Grundvoraussetzung für die Anwendung von Reaktionsmodellen ist das Vorhandensein qualitativ guter und intern konsistenter thermodynamischer Daten, d.h. ein Datensatz, der zu widerspruchsfreien Ergebnissen führt. Ein solcher Datensatz für Bauwerke im Salinar wird mit der Thereda-Datenbasis in einem Langfristprojekt aufgebaut. Daneben ist auch die richtige Beschreibung von Mischphasen elementar. In zementären Systemen gibt es immer mehrere Mischphasen. Zum einen die Porenflüssigkeit, zum anderen die C-S-H-Phase (die eher als C-N-A-S-H-Phase vorliegt), die AFt und die AFm-Phase(n). „Von besonderer Bedeutung für die Modellierung chemischer Reaktionen in Systemen mit hoher Ionenstärke ist die Verwendung des Pitzer-Modells zur Bestimmung der Aktivitätskoeffizienten der gelösten Teilchen. Nur das Pitzer-Modell ist in der Lage in diesem Milieu realistische Aktivitätskoeffizienten zu liefern.“ Dazu sind entsprechende Wechselwirkungsparameter zur Berechnung der Aktivitätskoeffizienten der gelösten Spezies nötig. Die thermodynamischen Daten sind immer im Zusammenhang mit den Pitzer-Parametern zu sehen.

Ein thermodynamisches Modell liefert nur Gleichgewichtszustände. Die chemische Kinetik von Reaktionen in porösen Körpern wird im Wesentlichen durch die ablaufenden Transportprozesse im Porenraum bestimmt. „Bei sehr langsamen Reaktionen kann es“ jedoch „auch notwendig sein, zusätzliche reaktionskinetische Effekte zu berücksichtigen, die nicht auf die begrenzte Transportgeschwindigkeit der einzelnen Spezies im Porenraum des Bauteils zurückzuführen sind“, sondern auf die begrenzte Geschwindigkeit der Reaktion zwischen Porenwandung und Porenflüssigkeit. Ein entsprechendes Modell für Fälle mit Diffusion und Kapillartransport im Porenraum ist in der Software Transreac integriert. (Schmidt-Döhl, 1996) Für die zu berücksichtigenden Reaktionen müssen die Geschwindigkeitskonstanten bekannt sein, außerdem die Porenradienverteilung des Materials.

Prinzipiell ist es auch möglich Sorptionsprozesse in einem Reaktionsmodell zu simulieren. Dazu müssen nur die thermodynamischen Eigenschaften der adsorbierten Phasen entsprechend beschrieben werden.

Simulation von Veränderungen der Porosität, Porenstruktur und Transportparametern

Veränderungen des Phasenbestandes im Bauteil ziehen Veränderungen der Porosität nach sich. Um diese berechnen zu können wird die Dichte bzw. das Molvolumen der festen Spezies benötigt. Es gibt eine Reihe von Gleichungen, mit denen die Veränderung von Transportkenngrößen als Funktion der Porosität beschrieben werden kann, z.B. aus Gaber (1989). Um diese nutzen zu können, müssen verschiedene Porositätskenngrößen und die Trockenrohddichte der beteiligten Materialien bekannt sein. Die in den Gleichungen vorkommenden Umwegfaktoren werden aus den Transport- und Porositätskenngrößen des unkorrodierten Materials bestimmt. Die in Transreac verwendeten Gleichungen sind in Schmidt-Döhl (1996) und Rigo (2005) aufgeführt. Natürlich führen chemische Reaktionen nicht nur zu einer Veränderung der Porosität, sondern auch der Porenstruktur, je nachdem in welchen Poren Phasen neu entstehen oder Phasen mit ihrer charakteristischen Korngröße weggelöst werden. Dies ist jedoch sehr viel schwieriger zu beschreiben, so dass entsprechende Zusammenhänge bislang kaum berücksichtigt werden. Erste Ansätze in dieser Richtung können aus der Dissertation von H. Goedeke (2018) entnommen werden.

Simulation korrosiver Effekte und THCM-Modellierung

Korrosive Effekte sind z.B. Massenverlust, Ablösung von Material, Festigkeitsverlust, Treibdehnungen, Rissbildungen usw. Die Modellierung entsprechender Prozesse kann als ein Aspekt einer THCM-Modellierung aufgefasst werden. Ortsabhängige Veränderungen der Festigkeit können z.B. über die Gleichung von Balshin (Schmidt-Döhl, 1996) als Funktion der Porosität beschrieben werden. Dazu werden die charakteristischen Festigkeiten der festen Spezies benötigt, das ist die hypothetische Festigkeit eines Materials bei einer Porosität von Null. So bleibt bei vielen lösenden Angriffen auf zementgebundene Werkstoffe amorphes SiO_2 übrig, was entsprechenden korrodierten Randschichten eine gewisse Restfestigkeit gibt, die über den Ansatz von Balshin und Nutzung der Festigkeit von Quarzglas als charakteristische Festigkeit von amorphem SiO_2 recht gut berechnet werden kann.

Der Masseverlust bei lösendem Angriff kann zunächst über die Konzentrationen und die Dichten der vorhandenen Feststoffphasen an einem Volumenelement berechnet werden. Sinkt die Festigkeit eines Volumenelementes unter einen Grenzwert kann eine komplette Ablösung simuliert werden, indem ein Platzwechsel von Volumenelementen berechnet wird, bei dem sich z.B. eine angreifende Lösung zwischen das korrodierende Bauteil und das abgelöste feste Volumenelement schiebt.

Schwierig ist noch immer die Modellierung von Treibdehnungen und Rissbildungen. Die Software Transreac enthält ein physikalisch-chemisch begründetes Modell, mit dem die freie Dehnung und Rissbildung zementgebundener Baustoffe beim Angriff einer Sulfatlösung und Neubildung des Treibminerals Ettringit berechnet werden kann. Dazu muss die Zugbruchdehnung und die Porenradienverteilung des Materials bekannt sein. Auch die Diffusion in den neu entstandenen Rissen ist berechenbar. (Schmidt-Döhl, 1996, Rigo et al. 2005). Es ist auch möglich Feuchte- und Temperaturdaten aus Transreac an die FEM-Software Ansys zu übergeben, um dort Verformungen zu berechnen. Eine echte Kopplung zu einem THCM-Modell stellt dies allerdings nicht dar.

Deterministische und probabilistische Modellierung

Die Bemessung im Bauwesen beruht heute auf Ansätzen mit dem Ziel für ein Bauwerk oder Bauteil eine definierte Versagenswahrscheinlichkeit nicht zu überschreiten. Für solche Berechnungen benötigt man probabilistische Modelle. „Ein probabilistisches Modell berücksichtigt im Gegensatz zu einem deterministischen Modell die statistischen Streuungen der Eingangsgrößen und liefert Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die berechneten Größen.“ Damit können Versagenswahrscheinlichkeiten berechnet werden. Für eine probabilistische Dauerhaftigkeitsbemessung wird die statistische Verteilung aller relevanten Eingangsgrößen benötigt (Art der Verteilung, Kenngrößen der Verteilung). Welche Daten relevant sind ergibt sich aus einer Sensitivitätsanalyse. Ein besonderes Problem dabei ist die große Streuung von Materialdaten. Die grundsätzliche Vorgehensweise für die probabilistische Dauerhaftigkeitsbemessung ist:

- Entwicklung oder Auswahl eines Schädigungsmodells und Definition der Schädigungstiefe für den konkreten Schadensprozess, was keinesfalls trivial ist
- Festlegung der Grenzzustände für Gebrauchstauglichkeit bzw. Tragfähigkeit
- Festlegung der maximal zulässigen Versagenswahrscheinlichkeit

Dann hat man zwei grundsätzliche Möglichkeiten die zeitabhängige Versagenswahrscheinlichkeit zu bestimmen: Die Zuverlässigkeitstheorie erster oder zweiter Ordnung (FORM/SORM Methodik) oder die Anwendung der Monte Carlo Methodik auf ein deterministisches Schädigungsmodell (ohne direkte Grenzzustandsgleichung). Dies wurde für das Programm Transreac in Rigo (2005) verwirklicht. In dieser Arbeit wird auch allgemein auf probabilistische Dauerhaftigkeitssimulation eingegangen.

Forschungsbedarf

Die größten Unsicherheiten bei der THC(M)-Modellierung stecken in folgenden Prozessen:

- „Die Veränderung der Transportparameter während des Korrosionsprozesses
- Die Simulation kapillarer Transportprozesse im korrodierten Bereich“, insbesondere auch in gerissenen Bereichen
- „Einige Aspekte der Simulation korrosiver Effekte“, insbesondere Prozesse bei denen ein Material erst dichter wird, dann poröser sowie die Berechnung von Dehnungen und Rissbildungen durch Treibprozesse
- „Fehlende oder inkonsistente thermodynamische Daten für das Reaktionsmodell“
- Asymmetrien in symmetrischen mehrdimensionalen Problemen, die aufgrund von begrenzter Rechengenauigkeit unvermeidbar sind

Experimentelle Tests für THC-Simulationen

Folgende Tests sind vor dem Einsatz einer THC-Simulation sinnvoll. Dabei werden die experimentellen Ergebnisse mit den entsprechenden berechneten Daten verglichen. „Diese Vorgehensweise ist beispielhaft gezeigt in Schmidt-Döhl (2009).“

- „Zusammensetzung des angreifenden Mediums. Beispielsweise ist es bei hochkonzentrierten gesättigten Lösungen keinesfalls selbstverständlich, dass ein Reaktionsmodell deren Zusammensetzung richtig berechnen kann. Die Güte der thermodynamischen Datenbasis spielt dabei eine wichtige Rolle.
- Ausgangs-Phasenbestand der unkorrodierten Baustoffe, soweit er experimentell ermittelt werden kann.
- Veränderungen des Phasenbestandes der beteiligten gemahlten Baustoffe im Gleichgewicht mit dem angreifenden Medium, z.B. einer Lösung, bei definierten Feststoff-Lösungs-Verhältnissen und/oder Untersuchungen des Reaktionspfades, z.B. mit Hilfe von Kaskadenexperimenten.
- Korrosionsexperimente mit den in der Realität zu erwartenden Transportprozessen. Bei sehr dichten Materialien können solche Korrosionsexperimente in

vertretbaren Zeiträumen sehr schwierig werden. Für die chemischen Analysen sind dann Messmethoden mit hoher Ortsauflösung notwendig. Ggf. ist es notwendig zum Nachweis der richtigen Funktion des Simulationsverfahrens ein gesondertes Material herzustellen, das dem eigentlich interessierenden Material chemisch möglichst ähnlich ist, aber dessen Porensystem durchlässiger ist.“ „Nur bei der Simulation von Korrosionsversuchen selbst werden auch die Transportmodelle und das Zusammenwirken der miteinander gekoppelten chemisch-physikalischen Modelle untersucht. Deshalb stellt das Korrosionsexperiment der wichtigste Schritt in einer solchen Untersuchungsreihe dar. Nur wenn diese Tests zufriedenstellend verlaufen, kann ein Simulationsprogramm für Berechnungen in dem jeweiligen System eingesetzt werden.“

Literatur

Gaber, K: Einfluß der Porengrößenverteilung in der Mörtelmatrix auf den Transport von Wasser, Chlorid und Sauerstoff in Beton. Dissertation, Universität Darmstadt, 1989

Goedeke, H.K.: Lösender Angriff auf zementgebundene Baustoffe – Veränderungen der Porenstruktur und Folgen für Transport- und Korrosionsprozesse. Dissertation, TU Hamburg, 2018

Heidmann, M.: Feuchtebedingter Haftungsverlust von Gipsputz auf Beton - Experimentelle Untersuchung und rechnerische Simulation. Papierflieger Verlag, Clausthal Zellerfeld, 2013, ISBN 978-3-86948-387-0. Zugleich: Dissertation TU Hamburg-Harburg, 2013

Rigo, E.: Ein probabilistisches Konzept zur Beurteilung der Korrosion zementgebundener Baustoffe durch lösenden und treibenden Angriff. 2005. Heft 186 der Schriftenreihe des Instituts für Baustoffe, Massivbau und Brandschutz, ISBN 3-89288-169-3. Zugleich: TU Braunschweig, Dissertation, 2005

Rigo, E.; Schmidt-Döhl, F.; Krauß, M.; Budelmann, H.: Transreac: A model for the calculation of combined chemical reactions and transport processes and its extension to a probabilistic model. Cement and Concrete Research, Vol. 35, p. 1734-1740, 2005, DOI: 10.1016/j.cemconres.2004.10.004

Schmidt-Döhl, F.: Ein Modell zur Berechnung von kombinierten chemischen Reaktions- und Transportprozessen und seine Anwendung auf die Korrosion mineralischer Baustoffe. Dissertation, Technische Universität Braunschweig, 1996. Auch als Heft 125 der Schriftenreihe des Instituts für Baustoffe, Massivbau und Brandschutz der TU Braunschweig, ISBN 3-89288-104-9. Digitale Bibliothek Braunschweig <https://doi.org/10.24355/dbbs.084-201409231252-0>

Schmidt-Döhl, F.: Dauerhaftigkeitsprognose von Salzbeton im Kontakt mit salinaren Lösungen. Tagung Bauchemie, Energie und Nachhaltigkeit im Bauwesen der Gesellschaft Deutscher Chemiker, Freiberg, 8.-9.10.2009. GDCh Monographie Band 41, S. 81-88, ISBN 978-3-936028-61-4, 2009. Reprint in: Nothnagel, R.; Twelmeier, H. (Hrsg.): Baustoff und Konstruktion, Festschrift zum 60. Geburtstag von Harald Budelmann. Springer Verlag, Berlin, S. 425-432, 2013. ISBN 978-3-642-29572-0

Schmidt-Döhl, F. Materialprüfung im Bauwesen. Fraunhofer irb-Verlag, Stuttgart, 2013

1.16

M. Polster¹, C. Lerch¹, A. Carstensen², M. Heydorn²,
M. Herklotz¹, A. Hussein¹, N. Müller-Hoeppe¹, T. Schröpfer² und A. Weis²:

**Numerische Umsetzung des Abbindeverhaltens
erhärtender Baustoffe**

¹ BGE TECHNOLOGY GmbH, Peine, Deutschland

² Bundesgesellschaft für Endlagerung (BGE), Peine, Deutschland

Email: Mirko.Polster@bge.de

Zusammenfassung

Salz- und Sorelbetone sind Baustoffe, die – auch als Massenbaustoff - in einem Endlager im Salz verwendet werden. Werden Prognosen oder Sicherheitsnachweise numerisch geführt, sind mathematische Modelle zur Beschreibung des Materialverhaltens erforderlich, die im gebirgsmechanischen Kontext das mechanische und das thermische Verhalten erfassen können. Für Salz- und Sorelbetone wird das Materialverhalten und darauf aufbauende Modelle dargestellt und im Vergleich mit in situ gemessenem Verhalten an Bauwerken der Asse und des ERAM beispielhaft gezeigt.

Einleitung

Bei einem Endlager im Salz wird angestrebt, möglichst wenig Volumen offen zu lassen. Als Verfüll- und Versatzmaterial wird das zum Wirtsgestein arteigene Salzgrus verwendet. Werden höhere mechanische oder hydraulische Anforderungen an das Material gestellt, kommen erhärtende Baustoffe zum Einsatz. Hier werden Baustoffe betrachtet, bei denen Salzgrus der wesentliche Zuschlagstoff ist. Vor dem Hintergrund eines derartigen Einsatzzweckes kommen in den Projekten der BGE zwei Baustoffgruppen zur Anwendung: Salzbetone, damit werden zementgebundene Baustoffe bezeichnet, und Sorelbetone, welche auf MgO als Bindemittel basieren. Für den Salzbeton M2 und den Sorelbeton A1 ist in Tab. 1 die jeweilige Rezeptur angegeben.

Beide Baustoffe stellen wegen bestehender Varianten eher Baustofffamilien dar. Sie werden bzw. wurden als Massenbeton eingesetzt, M2 im ERAM und A1 in der Asse. Die Baustoffe kommen dabei mit und ohne spezifische Qualitätsanforderungen an das Bauwerk zum Einsatz. Aus Sicht der Auslegung eines Endlagers im Salz könnte eine zu betrachtende Struktur als Komponenten den Baustoffkörper, eine Kontaktzone, eine konturnahe Schädigungszone sowie das intakte Wirtsgestein enthalten, Abb. 1a.

Tab. 1 Rezepturbestandteile [kg/m³]

Bestandteil	Salzbeton M2		Sorelbeton A1	
	Bindemittel	CEM III	328	MgO
Zusatzmittel	Steinkohleflugasche	328	-	-
Zuschlagstoff	Salzgrus	1072	Salzgrus	1237
Zugabewasser / -flüssigkeit	Wasser	267	MgCl ₂ -Lsg. Nahe R	485

Im Rahmen betrachtungsspezifischer Annahmen und Voraussetzungen sowie der Komplexität des Stoffmodells für das Wirtsgestein können Zonen zusammengelegt werden oder entfallen. Mögliche Fragestellungen aus einem derartigen Einsatz könnten aus der Wärmefreisetzung des Baustoffs resultieren, so dass an dieser Stelle ein rein thermischer Ansatz im Vordergrund steht, Abb. 1b.

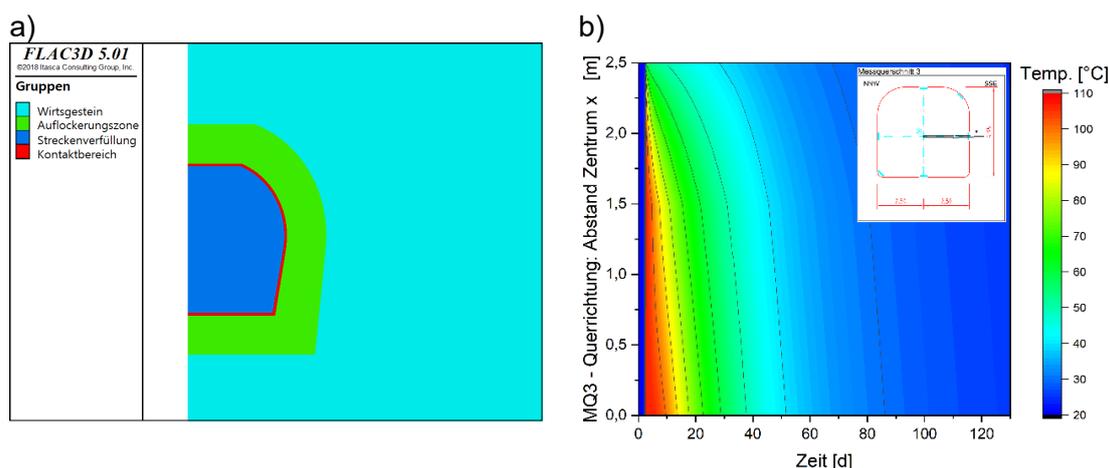


Abb. 1 Numerische Modellierung - a) Querschnitt durch ein Berechnungsmodell einer Abdichtung mit Zonen spezifischer Eigenschaften; b) Temperaturprofil in Querrichtung (x) einer mit Sorelbeton A1 erstellten Barriere in Abhängigkeit von der Zeit

Weitergehende Fragestellungen ergeben sich für die Bauzustände und das Langzeitverhalten, was weitere Prozessklassen in den Fokus bringt. Als Prozessklasse wird das Verhalten innerhalb eines naturwissenschaftlichen Teilbereichs verstanden. Für ein Endlager radioaktiver Abfälle im Salz existieren am Salz und den hier betrachteten erhärtenden Baustoffen Einflüsse, die der chemischen (C), thermischen (T), hydraulischen (H), mechanischen (M), biologischen (B) und radiologischen (R) Prozessklasse zugeordnet werden können, Abb. 2a. Zusätzlich zum Verhalten innerhalb der einzelnen Klasse gibt

es gekoppelte Prozesse, die aus der Interaktion mehrerer Prozessklassen resultieren. Das ist z. B. bei der thermischen Expansion der Fall, bei der eine Temperaturänderung eine Volumenänderung nach sich zieht. Für die hier behandelten Baustoffe reduziert sich die Betrachtung auf die Klassen THMC. Der eigentlich treibende Prozess bei der Erhärtung der Baustoffe ist eine chemische Reaktion, bei der im Zuge von Phasenbildung freies Wasser in die Struktur des Baustoffes eingebunden wird, Wärme freigesetzt wird und sich strukturelle Änderungen ergeben. Dieses komplexe Verhalten wird hier jedoch nicht durch ein Entwicklungsmodell der Hydratphasen unter Abbau von Porenlösung abgebildet, sondern nur in seiner thermischen Wirkung der Wärmeproduktion. Daher wird die komplexe Interaktion der Prozessklassen auf THM-Systeme reduziert, Abb. 2b. Hydraulische Betrachtungen zielen dabei weiter einschränkend nicht auf den o. g. Einbau von Porenlösung, sondern auf die Möglichkeit hydraulischer Transportsimulation und Fluiddruckbetrachtungen entsprechend der Richards-Mechanik. Allein auf das Baustoffverhalten reduziert kann das Verhalten als TM-gekoppeltes Verhalten bezeichnet werden.

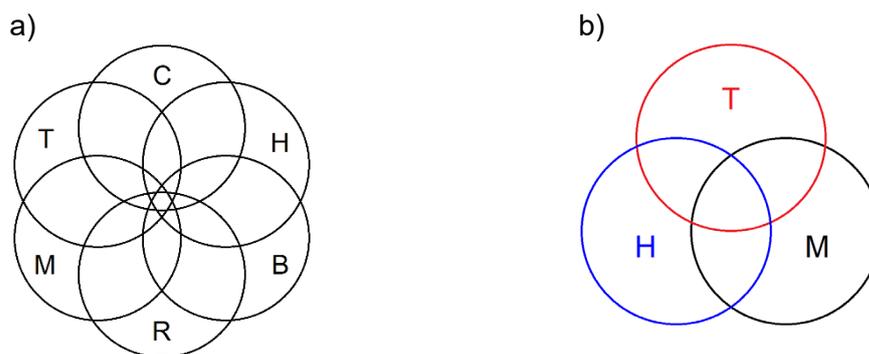


Abb. 2 Prozessklassen - a) Komplexer Einfluss; b) Reduktion auf THM-Prozesse

Mit den Bauzuständen wird ein Zeitbereich bezeichnet, welcher im Wesentlichen durch die thermische Aktivität des Baustoffs geprägt ist. Aufgrund der thermischen Eigenschaften aller Materialien des Gesamtsystems und des thermischen Verhaltens in der Verzögerungsphase geht der Betrachtungszeitraum jedoch über den primär vom Baustoff bestimmten Zeitbereich hinaus. Im Bereich des Langzeitverhaltens stehen finale Zustände und Langzeitprozesse des Baustoffs im Vordergrund.

Das aktuelle Ziel des Modells ist die Beschreibung des thermomechanischen Verhaltens eines erhärtenden Baustoffs in seiner Festkörperphase, welche bereits im jungen Betonalter beginnt. Der zeitliche Einsatz der thermischen Prozessklasse beginnt bereits mit dem Anmischen des Baustoffs, spätestens jedoch mit dem Einbringen des Baustoffs.

Im Vordergrund steht zunächst das thermische Verhalten als Reduktion des chemischen Prozesses auf seine thermische Auswirkung. Abhängig vom Hydratationsgrad als der zustandsbeschreibenden inneren Variable werden als wesentliche Elemente die zeitabhängige Wärmefreisetzungsrates, die Wärmeleitung und die Wärmekapazität beschrieben. Zusätzlich zum thermischen Verhalten wird das mechanische Materialverhalten mit einem Ansatz aus elastischen, plastischen, autogenen und viskosen Anteilen abgebildet. Der Bruchzustand des plastischen Verhaltens wird als Grenzzustand beschrieben. Die realitätsnahe Simulation des eigentlichen Bruchvorgangs hat eine nachrangige Bedeutung, da sowohl in der Baupraxis als auch in den rechnerischen Nachweisen ein hinreichender Abstand zu Grenzzuständen angestrebt wird. Sämtliche Teilprozesse erweisen sich als vom Erhärtungszustand abhängig, in Teilen von der Temperatur und von der Spannung.

Stoffmodell

Im kontinuumsmechanischen Umfeld werden i. A. Stoffmodelle eingesetzt, welche im günstigsten Fall identifizierte Prozesse repräsentieren, sonst die phänomenologische Abbildung des gemessenen Verhaltens sind. Im vorliegenden Fall kommen empirische Ansätze zum Tragen. Für jede Prozessklasse werden die entsprechenden Stoffmodelle formuliert. Zunächst wird das thermische Verhalten behandelt, im Anschluss das mechanische.

Thermisches Stoffmodell

Die Bildung der Bindemittelphasen im Baustoff, nämlich der CSH-Phasen im Salzbeton und der Sorelphasen im Magnesiabaustoff, sind exotherme Reaktionen. In Abb. 1b ist ein aus einer derartigen Reaktion resultierender Temperaturverlauf am Beispiel einer Abdichtung aus Sorelbeton A1 gezeigt. Als Maximaltemperatur wird bei der Simulation im Kern kurzfristig eine Temperatur von ca. 105 °C erreicht.

Ein ähnliches Temperaturprofil mit einer Maximaltemperatur von 90 °C wurde in [ESA 18] zur experimentellen Bestimmung der Phasenbestandsentwicklung in Anlehnung an in-situ-Messdaten des A1 nachgestellt, Abb. 3. Wie die Ergebnisse der zeitabhängigen Phasenbestimmungen zeigen, geht die Temperaturentwicklung mit der kinetisch kontrollierten Bildung der 5-1-8, 9-1-4 und amorphen Phase einher. Zusätzlich ist in [ESA 18] anhand von zwei weiteren Temperaturkurven (Maximaltemperatur 60 °C und 120 °C) der Temperatureinfluss auf die Phasenbestandsentwicklung bestimmt worden.

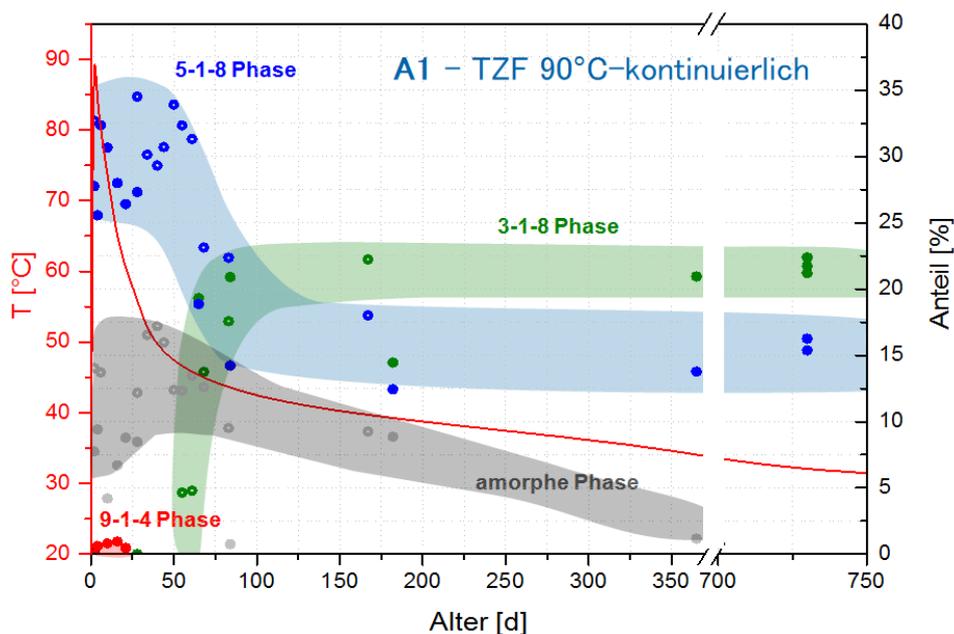


Abb. 3 Zeitliche Entwicklung der 3-1-8, 5-1-8 und der 9-1-4 Phase sowie der amorphen Phase bei einem Temperatur-Zeit-Fenster (TZF) mit Maximaltemperatur von 90 °C [ESA 18]

Wie bereits in der Einleitung geschrieben, kommt in der Berechnung, die Abb. 1b zugrunde liegt, anstelle eines CT-gekoppelten Modells ein rein thermisches Modell zum Tragen. Im Fall der hier modellierten Erwärmung wird die chemische Reaktion also allein auf ihre thermische (und mechanische) Wirkung zurückgeführt. Auch wenn hier kein reaktionskinetisches Modell unmittelbar zum Einsatz kommt, ist die Reaktionskinetik durch ihre Wirkung mit enthalten. Das Systemverhalten wird als instationäres Wärmeleitungsproblem mit dem Baustoff als aktiver Wärmequelle beschrieben. Um das Erhärtungsverhalten des Baustoffs zu beschreiben, werden jedoch typischerweise konstante Randbedingungen verwendet, das sind entweder isotherme Bedingungen oder adiabatische. Für adiabatische Randbedingungen ist in [BYF 80] das Modell zeitlicher Entwicklungsphasen von Kondo & Ueda dargestellt, Abb. 4a. Die Unterteilung in fünf Phasen (S_I Ansteifungsphase, S_{II} Ruhephase, S_{III} Beschleunigungsphase, S_{IV} Verzögerungsphase, S_V Ausklingphase) erfolgt auf der Basis der Wärmefreisetzungsrate. Im Vergleich mit der Messung an einer Variante des Sorelbetons A1, Abb. 4b – schwarze Kurven, zeigt sich, dass dieses Entwicklungsmodell zementgebundener Baustoffe auch auf Sorelbetone angewendet werden kann. Das Stoffmodell wird daher sowohl für Salz- wie Sorelbeton verwendet.

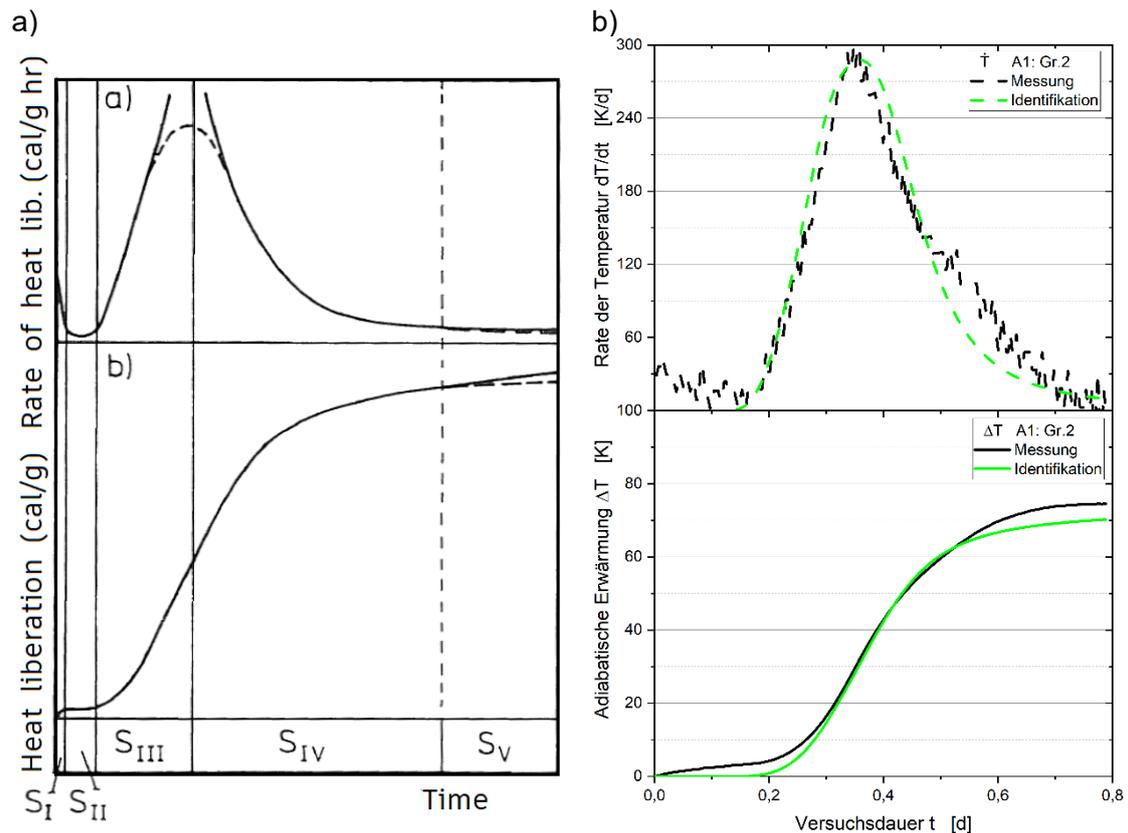


Abb. 4 Wärmefreisetzung - a) Einteilung in zeitliche Freisetzungsphase nach Kondo & Ueda in [BYF 80]; b) Gemessenes und identifiziertes thermisches Verhalten für eine Variante des Sorelbetons A1 (Gruppe 2, Starttemperatur 34,4 °C)

Grundlage des thermischen Verhaltens ist die Wärmeleitungsgleichung, Gl. 1

$$\rho c_p \dot{T} = \lambda \nabla^2 T + \dot{Q}_c \quad (1)$$

mit

ρ	Dichte	$\lambda(\alpha, T)$	Wärmeleitfähigkeit
$\alpha(t_e)$	Hydratationsgrad/Erhärtingsgrad	$c_p(\alpha, T)$	massespez. Wärmekapazität
t_e	wirksames Betonalter	$Q_c(\alpha)$	volumenspezifische Wärme
T	Temperatur		

Die beiden Materialfunktionen λ und c_p werden dabei als jeweils linear von Erhärtingsgrad und Temperatur beschrieben. Der zentrale Aspekt der o. g. Gleichung ist jedoch die Funktion der Wärmeproduktion. Für ein adiabatisches System reduziert sich Gl. 1 zu $\rho c_p \dot{T} = \dot{Q}_c$ bzw. in inkrementeller Form zu $\rho c_p \Delta T = \Delta Q_c$. Wird davon ausgegangen, dass die Erhärtung vollständig durchlaufen ist und dass nur der Bindemittelanteil C des Baustoffs zur Wärmeproduktion beiträgt, ergibt sich $\rho c_p \Delta T_{max} = C \Delta Q_{ce,max}$.

In [BYF 80] sind für den Erhätungsgrad fünf Definitionen angegeben, die sich in den verwendeten Größen – Zementgel, hydratisierter Zement, nichthydratisierter Beton, gebundenes Wasser und Wärme - unterscheiden. Mit thermodynamischem Bezug verbleibt die letzte, Gl. 2

$$\alpha = \frac{Q_c(\alpha)}{Q_{c,max}} = \frac{Q_{ce}(\alpha)}{Q_{ce,max}} \quad (2)$$

Zwischen dem Erhätungsgrad und dem wirksamen Betonalter ist der Zusammenhang in [BYF 80] beschrieben worden, der in [JON 95] verfeinert wurde, Gl. 3

$$\alpha(t_e) = e^{-a \left(\ln \left(1 + \frac{t_e}{t_1} \right) \right)^{-b}} \quad (3)$$

a , b und t_1 sind Materialparameter, wobei $a = 1$ gesetzt wurde.

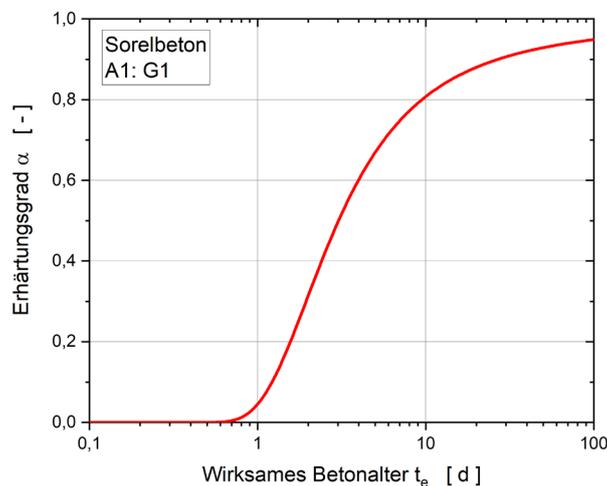


Abb. 5 Zusammenhang zwischen Erhätungsgrad und wirksamen Betonalter für eine Variante des Sorelbetons A1

Aus Sicht eines Stoffmodells stellt der Hydratationsgrad α und das wirksame Betonalter t_e innere Zustandsvariablen dar, welche die Erhätung in unterschiedlichen Wertebereichen abbilden: $\alpha = [0; 1]$, $t_e = [0; \infty)$. Für eine Variante des Sorelbetons A1 ist in Abb. 5 der Zusammenhang zwischen Hydratationsgrad und wirksamem Betonalter dargestellt. In Verbindung mit z. B. Abb. 4b zeigt sich die Bedeutung des Hydratationsgrades, Gl. 2, und in Verbindung mit Abb. 4a ist zu erkennen, dass die Ansteifungsphase in diesem Stoffmodell unberücksichtigt bleibt. Weiterhin findet in der Ruhephase keine Zustandsänderung statt, während sowohl aus der nach der Vorstellung in [BYF 80] als auch dem gemessenen Verhalten, Abb. 4b, eine geringe Rate an Wärme vom Baustoff produziert

wird. Insgesamt finden alle Zustandsänderungen im Modell erst ab einer Totzeit, in Abb. 5 ist es ein wirksames Betonalter von ca. 0,6 d, statt.

Um den Erhärtungsprozess in seiner Entwicklung beschreiben zu können, ist eine Evolutionsgleichung einer der beiden inneren Zustandsvariablen erforderlich – die Umrechnung zwischen den beiden Größen war in Gl. 3 gegeben. Dazu wird als Reifefunktion der Zusammenhang zwischen wirksamen Betonalter und Realzeit verwendet, der nach [FRE 77] auf einer Arrhenius-Funktion aufbaut, Gl. 4

$$\dot{t}_e = e^{-\frac{E_A(T)}{R} \left(\frac{1}{T_{Ref}} - \frac{1}{T} \right)} \quad (4)$$

mit

E_A	Aktivierungsenergie	R	Universelle Gaskonstante
T_{Ref}	Referenztemperatur		
	$T_{Ref} = (273,15 + 20) K$		

Als Aktivierungsenergie ist in [FRE 77] eine abschnittsweise definierte Funktion angegeben $E_A(T) = E_{A,20} \forall T \geq T_{Ref} \cup E_{A,20} + k(T_{Ref} - T) \forall T < T_{Ref}$ wobei die Materialparameter mit $E_{A,20} = 33,5 \text{ kJ/mol}$ und $k = 1,47 \text{ kJ/(mol} \cdot \text{K)}$ für zementgebundene Standardbetone angegeben worden sind. Abweichend davon wurde in [POL 06] für den Sorelbeton 29.6 A2 eine Sprungfunktion mit Sprungstelle bei 25 °C und deutlich abweichender Aktivierungsenergie verwendet. Im Rahmen einer flexibleren Anpassung mit Näherung an beiden o. g. Funktionen wird für die Aktivierungsenergie eine vollständig differenzierbare Sigmoidalfunktion verwendet, Gl. 5

$$E_A(T) = E_{A,1} + \frac{E_{A,2} - E_{A,1}}{1 + e^{\frac{T - T_{EA}}{dT}}} \quad (5)$$

mit

$E_{A,1}, E_{A,2}$	Grenzwerte der Aktivierungsenergie	T_{EA}, dT	Materialparameter
--------------------	------------------------------------	--------------	-------------------

Unabhängig von der Funktion der Aktivierungsenergie ist aus Gl. 4 erkennbar, dass der Erhärtungsprozess bei Temperaturen über T_{Ref} schneller abläuft und bei Temperaturen unter T_{Ref} langsamer.

In Abb. 4b – grüne Kurven – ist die Anwendung des in Gl. 2 bis Gl. 5 beschriebenen Stoffmodells auf ein adiabatisches Materialverhalten dargestellt. Das thermische Modell ist von seinem mathematischen Ansatz her in der Lage, eine zeitlich unbegrenzte Wärmefreisetzung abbilden zu können. Bei einem zu geringen Anteil an Zugabeflüssigkeit

oder wegen thermischer Effekte kann die Erhärtung zum Erliegen kommen. Daher können im Stoffmodell zusätzlich Beschränkungen in der erreichbaren Temperatur und in dem Hydratationsgrad genutzt werden. Eine derartige Begrenzung ist in der Variantengruppe 1 des Sorelbetons A1 erkennbar, Abb. 6. Das gemessene Verhalten dieser Gruppe, Abb. 6a, weist gegenüber dem Verhalten der Gruppe 2, Abb. 4b, eine innerhalb kurzer Zeit beendete Erhärtung aus. Welchen Einfluss die Anmisch- und Einbringtemperatur auf den gesamten Erhärtungsprozess hat, ist in Abb. 6b erkennbar. Je niedriger die Temperatur zu Beginn ist, umso länger ist die Ruhephase und auch die anschließenden wesentlichen Phasen der Wärmeproduktion erstrecken sich über einen längeren Zeitraum.

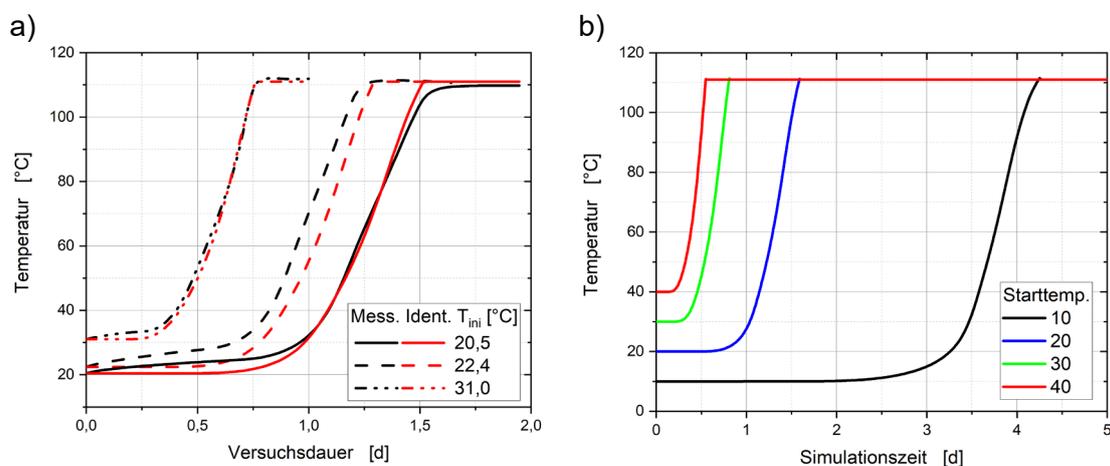


Abb. 6 Wärmefreisetzung im adiabatischen Zustand - a) Gemessenes und identifiziertes thermisches Verhalten des Sorelbetons A1 (Gruppe 1) bei unterschiedlichen Starttemperaturen; b) Einfluss der Starttemperatur auf den Erhärtungsprozess

Mechanisches Stoffmodell

Die Grundlage des mechanischen Stoffmodells ist die additive Zerlegung des Tensors der Gesamtdehnungsrate $\dot{\epsilon}$, Glg. 6

$$\dot{\epsilon} = \sum \dot{\epsilon}_i = \dot{\epsilon}_{el} + \dot{\epsilon}_{pl} + \dot{\epsilon}_a + \dot{\epsilon}_v + \dot{\epsilon}_{th} \quad (6)$$

mit folgenden Anteilen am Tensor der Dehnungsrate

$\dot{\epsilon}$	Gesamtdehnungsrate	$\dot{\epsilon}_{el}$	Elastischer Anteil
$\dot{\epsilon}_{pl}$	Plastischer Anteil	$\dot{\epsilon}_a$	Autogener Anteil
$\dot{\epsilon}_v$	Viskoser Anteil	$\dot{\epsilon}_{th}$	Thermischer Anteil

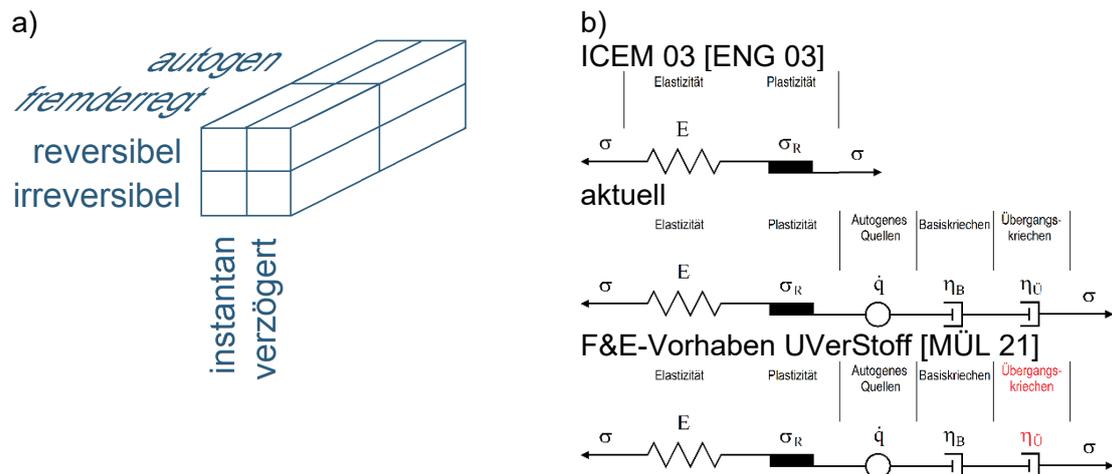


Abb. 7 a) Eigenschaftsschema mechanischer Teilprozesse aus numerischer Sicht; b) Entwicklungsstände des mechanischen Stoffmodells

Wegen der geplanten Anwendung des Stoffmodells bleiben Anteile wie das Trocknungsschwinden und die Anfangssetzung unberücksichtigt. Trocknungsschwinden wird wegen der fehlenden offenen Oberflächen im Untertageeinsatz zunächst als vernachlässigbar eingeschätzt – trotz möglicher hygroskopischer Eigenschaften der anstehenden Salze. Die Anfangssetzung wird baupraktisch durch die Druckhaltung in der Verfüllbohrung vermieden. Den o. g. Anteilen lassen sich Eigenschaftskombinationen des Schemas in Abb. 7a zuordnen, so ist z. B. die Plastizität fremderregt, irreversibel und instantan. Für typische Betonbauwerke können rechnerische Auslegungen auf der Basis des instantanen elastischen und plastischen Verhaltens und des Kriechens vorgenommen werden. Kriechen ist hier als das durch die Erhärtung kontinuierlich verzögernde Kriechen, was als Basiskriechen bezeichnet wird, zu verstehen - in der Salzmechanik würde dem Basiskriechen das stationäre Kriechen entsprechen. Während für die Beschreibung des Langzeitverhaltens dieser Ansatz bereits ausreichend ist, erfordert die Beschreibung der Bauzustände zusätzlich einen autogenen Anteil sowie durch die permanente Beanspruchungsänderung das Übergangskriechen – das primäre Kriechen der Salzmechanik, Abb. 7b. Zwischenzeitlich festgestellte Verbesserungen [MÜL 21] kommen bei den im folgenden Abschnitt gezeigten Anwendungen noch nicht zum Tragen.

Ein plastisches Verhalten bedeutet unabhängig vom Zeitverhalten nicht per se ein schädigungsbehaftetes Verhalten. Die Zuschlagskomponente Salz weist mit seinen beiden wesentlichen Deformationsmechanismen des Versetzungskriechens und des Drucklösungskriechens zwei schädigungsfreie viskoplastische Prozesse auf. Weiterhin ist es eine typische Eigenschaft versteifender Materialien – hier durch den Erhärtungsprozess

hervorgehoben – dass in einer zeitlichen Schleife aus Be- und Entlastung die elastischen Anteile wegen des zwischenzeitlichen Erhärtungsfortschritts unterschiedlich groß ausfallen. Der nicht rückbildbare Anteil verbleibt aufgrund der Erhärtung im Material.

In der Betontechnologie ist es üblich, das Deformationsverhalten der einzelnen Anteile in Relation zu einem Vergleichswert zu beschreiben. So ein Bezugswert kann ein Alterswert sein, wie z. B. der 28-Tage-Wert, oder der 28-Tage-Wert der uniaxialen elastischen Deformation. Auf einen derartigen Ansatz wird hier zugunsten des Endwertes verzichtet. Der Endwert ist der Wert bei vollständiger Erhärtung, $\alpha = 1$. Aus den Erläuterungen im Zusammenhang mit dem thermischen Stoffmodell wird ersichtlich, dass dieser Endwert erst nach sehr langer Zeit erreicht wird und daher von theoretischer Natur ist. Ein typischer Ansatz für die in Gl. 6 beschriebenen Deformationsanteile ist ein multiplikativer Split, Gl. 7, bestehend aus Endwert $\dot{\epsilon}_{ie}$, Erhärtungsanteil $f(\alpha)$, Temperatureinfluss $g(T)$ und Spannungseinfluss $h(\sigma_0, \mathcal{S})$. Angemerkt sei, dass es entsprechend Abb. 7a vom Deformationsanteil abhängt, ob und mit welcher funktionalen Abhängigkeit Temperatur- und Spannungseinfluss zum Tragen kommen.

$$\dot{\epsilon}_i = \dot{\epsilon}_{ie} \cdot f(\alpha) \cdot g(T) \cdot h(\sigma_0, \mathcal{S}) \quad (7)$$

Sowohl an vergleichsweise jungen Proben als auch an alten Proben konnte für Salz- und Sorelbeton ein Kriechverhalten nachgewiesen werden. Wie das primäre Kriechen in der Salzmechanik lässt sich ein Anlaufprozess nach einer Laständerung feststellen, der wegen der Erhärtung hier als Übergangskriechen bezeichnet wird. Anstelle der in der Betontechnologie typischen Prony-Serie wird ein rheologisches Ersatzmodell, Abb. 7b, mit variablen Koeffizienten verwendet.

Ein weiterer zeitabhängiger Prozess ist der autogene Deformationsprozess. Aus der Betontechnologie ist ein Schwindprozess bekannt und bei Salzbeton auch festgestellt. Eine derartige Entwicklung, jedoch als Quellprozess und damit aus mathematischer Sicht mit umgekehrten Vorzeichen, wurde beim Sorelbeton A1 festgestellt.

Alle mechanischen Teilprozesse werden als vom Hydratationsgrad abhängig beschrieben. Mit Ausnahme des autogenen Prozesses ist das jeweilige Deformationsverhalten zusätzlich vom Spannungszustand abhängig. Eine Temperaturabhängigkeit wird bei den viskosen Effekten angenommen.

Exemplarisch für das mechanische Stoffmodell wird die instantane Plastizität dargestellt. Während der Unterschied zwischen Dilatanzgrenze und Bruchgrenze bei

Standardbetonen und Salz ein Thema ist, liegt die Dilatanzgrenze für den Salzbeton und insbesondere für den Sorelbeton in der Nähe der Bruchgrenze. Wegen dieser Nähe beschränkt sich das Stoffmodell auf die Bruchgrenze. Für das Bruchverhalten wird ein Mehrflächenplastizitätsmodell verwendet, Gl. 8 und Abb. 8a.

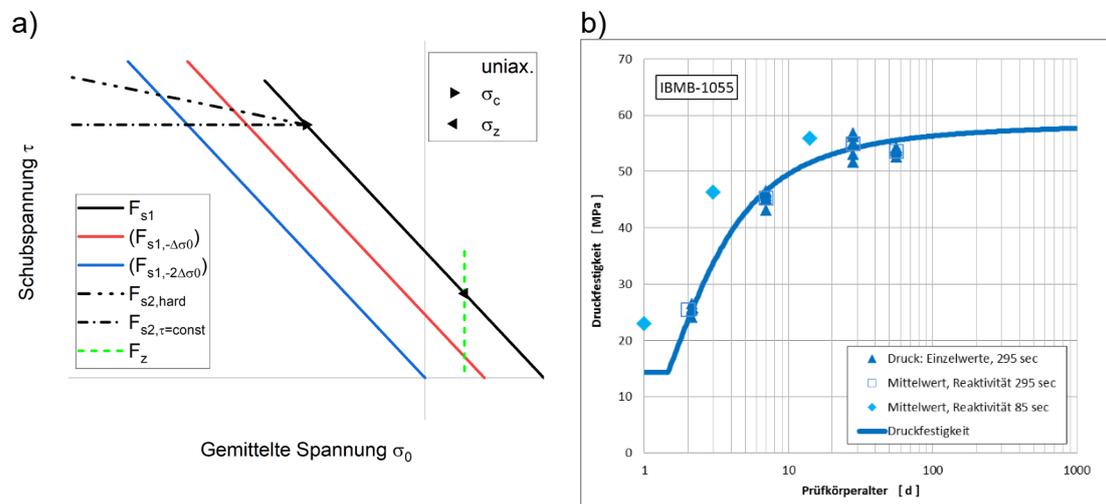


Abb. 8 Instantane Plastizität - a) Fließflächen; b) Druckfestigkeit – Messung mit Reaktivität von 85 sec und 295 sec, Anpassung an 295 sec

Grundlage ist eine nichtassoziierte Fließregel nach Drucker-Prager mit Zugversagen sowie Unterteilungsmöglichkeit im Scherversagen nach Fließfläche F_{s1} und F_{s2} . F_{s1} wird aus den uniaxialen Festigkeiten abgeleitet und F_{s2} beschreibt eine darüberhinausgehende Verfestigung; F_z beinhaltet Zugversagen.

$$F_{si} = \tau + q_{\phi, si} \sigma_0 - k_{\phi, si} \quad (8)$$

$$F_z = \sigma_0 - \sigma_{0,z}$$

mit

$$\tau \quad \text{Schubspannung } \tau = \sqrt{\frac{1}{2} S : S} \quad \sigma_0 \quad \text{Gemittelte Spannung } \sigma_0 = \frac{\sigma_t}{3}$$

$$q_{\phi, si}, k_{\phi, si} \quad \text{Materialparameter } F_{si} \quad \sigma_{0,z} \quad \text{Gemittelte Spannung } \sigma_{0,z} = \frac{\sigma_t}{3}$$

Die Materialparameter $q_{\phi, s1}$ und $k_{\phi, s1}$ ergeben sich aus den uniaxialen Festigkeitsversuchen mit σ_c als dem vorzeichenlosen Wert des (Zylinder-)Druckversuchs und σ_t als dem Wert des Zugversuchs, Gl. 9. Der Materialparameter $q_{\phi, s2}$ ist aus triaxialen Versuchen zu bestimmen und liegt zwischen 0 und $q_{\phi, s1}$.

$$\begin{aligned}
 q_{\phi,s1} &= \sqrt{3} \frac{\sigma_c - \sigma_t}{\sigma_c + \sigma_t} & q_{\phi,s2} &= [0; q_{\phi,s1}] \\
 k_{\phi,s1} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\sigma_c \sigma_t}{\sigma_c + \sigma_t} & k_{\phi,s2} &= k_{\phi,s1} + \frac{\sigma_c}{3} (q_{\phi,s1} - q_{\phi,s2})
 \end{aligned}
 \tag{9}$$

Der Einfluss der Erhärtung ist zur Vereinfachung in Gl. 8 und Gl. 9 vorhanden, aber nicht kenntlich gemacht. In Abb. 8b ist die gemessene zeitliche Entwicklung der Druckfestigkeit des Sorelbetons A1 für zwei unterschiedliche Reaktivitäten des MgO gezeigt. Die Anpassung erfolgte an den MgO mit 295 sec Reaktionszeit. Druck- ($x = c$) und Zugfestigkeit ($x = t$) werden gleichartig entsprechend Gl. 10 beschrieben. Die Materialparameter n_x sowie die Anfangsfestigkeit $\sigma_{x,min}$ und die Endfestigkeit σ_{xe} sind unabhängige Parameter. In der Folge variiert das Verhältnis aus Druckfestigkeit zu Zugfestigkeit über der Zeit. Sowohl für den Salzbeton M2 wie auch den Sorelbeton A1 liegt es aber im Bereich um 10.

$$\sigma_x(\alpha) = \max\left(\sigma_{xe} \left(\frac{\alpha - \alpha_0}{1 - \alpha_0}\right)^{n_x}; \sigma_{x,min}\right)
 \tag{10}$$

Validierung des Ansatzes

Das o. g. Stoffmodell ist bereits in mehreren Fällen zum Zweck der Validierung und der Prognose eingesetzt worden. Die Berechnungen wurden mit rein thermischen oder mit thermomechanischer Aufgabenstellung durchgeführt, Tab. 2.

Tab. 2 Anwendungen des Stoffmodells (Auszug)

Baustoff	Prozess	Anwendung
Salzbeton Rezepturen M2 bzw. M3	TM TM TM	Analysen zu Standsicherheit und Integrität der geologischen Barriere, ERAM Analyse bGZ, ERAM In-situ-Versuch Abdichtbauwerk im Steinsalz, ERAM
Sorelbeton A1	T TM TM	Bauwerk im Carnallit BW-K2C, Asse Blindschacht BS 4, Asse Pilotströmungsbarriere PSB-A1, Asse
Sorelbeton 29.6 A2	T T	Kavernenhals, Asse Pilotströmungsbarriere PSB-A2, Asse

Eine umfangreichere Darstellung der Anwendungen ist in [POL 23] gegeben. Hier wird der Stand der Validierung am Beispiel der Pilotströmungsbarriere A1 (PSB-A1) dargestellt.

Die Baumaßnahmen zur Errichtung der PSB-A1 sowie durchgeführte Messungen sind in [HEY 15] beschrieben worden. Eine Validierung des thermischen Verhaltens ist am Beispiel des Messquerschnitts (MQ) 5 in Abb.9a gezeigt. Durch die Unterbrechungen während der Betonage ist es erforderlich gewesen, im Systemverhalten zusätzlich zur Wärmeleitung, Gl. 1, den konvektiven Transport zu berücksichtigen. Als Konvektionsmodell kam ein vereinfachter Ansatz zum Tragen. Insgesamt zeigt sich, dass das thermische Verhalten mit wenigen Kelvin Abweichungen in den Maximaltemperaturen abgebildet werden konnte. Noch bestehende Abweichungen lassen sich wie folgt zurückführen: Das vereinfachte Konvektionsmodell bildet den Energietransport nur näherungsweise ab. Zudem führen Differenzen in der Sensorposition und/oder Differenzen im Verfüllschema zwischen Realbauwerk und Rechenmodell dazu, dass eine Auswertelocation einer abweichenden Verfüllschicht zugeordnet ist. Das lässt sich z. B. an der Sohle erkennen, bei der bereits Beton aus der Verfüllung des Widerlagers den Sensor erreicht hat. Die in [HEY 15] beschriebene Anomalie des Sensors MQ5/Mitte mit einer Maximaltemperatur von ca. 160 °C kann als solche bestätigt werden, indem durch das Baustoffverhalten im Normalfall nur ein Anstieg bis auf ca. 110 °C erklärbar ist - eine Ursache für die Differenz ließ sich nicht finden, es wird vermutet, dass abweichend vom normalen Bauprozess zusätzliche Lösung nach der Betonage eingebracht worden ist. Auf dem Abkühlungspfad macht sich die Phasenentwicklung als weitere gemessene, im Modell aber nicht berücksichtigte Wärmeproduktion bemerkbar.

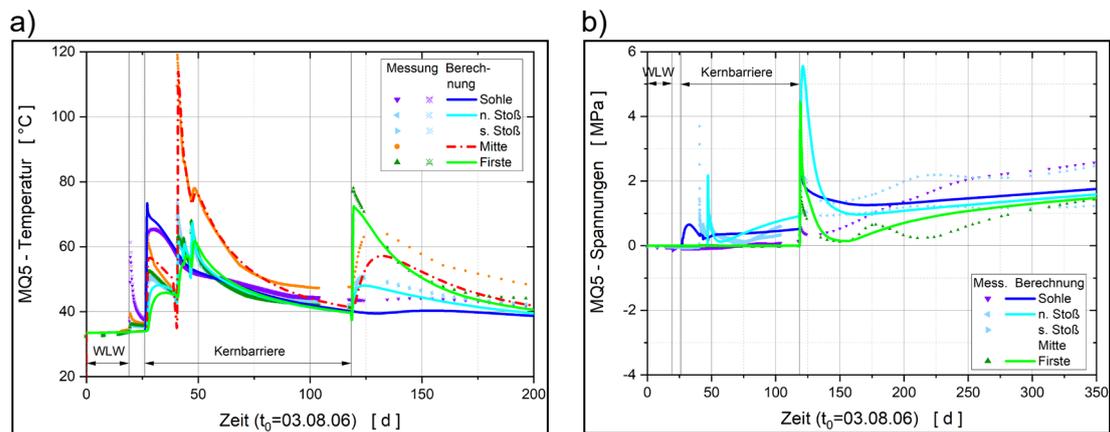


Abb. 9 Pilotströmungsbarriere A1, Messungen und Berechnungen im MQ5 - a) Temperatur; b) Spannung

Eine rein elastisch-plastische Auslegung, wie mit dem Modell ICEM 03 in Abb. 7b oben dargestellt, führt zu einer erheblichen Überschätzung der Spannungsextrême. Dabei sind die Materialparameter bereits entsprechend des Befundes, dass im Labor hergestellte Proben tendenziell zu höheren Werten führen, abgemindert. Erst mit den

zusätzlichen Teilprozessen, insbesondere dem Kriechen, gelingt es, die Form der Spannungsentwicklung zu erhalten und die Extremwerte zu reduzieren. Zugspannungen, die gerätebedingt messtechnisch nicht erfasst werden konnten - aber mit einem Maximalwert von 0,5 bis 1 MPa abgeschätzt werden - können im Modell mit ähnlichem Wert nachvollzogen werden. Die maximale Druckspitze liegt jedoch um den Faktor 2 bis 4 höher als die gemessenen Werte. Im langfristigen Verhalten kann der Spannungsaufbau wiederum abgebildet werden, Abb. 9b. Die o. g. Differenzen bei Lokation und Verfüllung wirken sich auch bei der Spannungsbewertung aus, sind aber für die rechnerische Abweichung nicht ausschlaggebend. Der für die Bewertung konservative Einfluss der Phasentwicklung mit temporären zusätzlichen Druckspannungen ist ebenfalls erkennbar.

Zusammenfassung

Das Erhärungsverhalten der Betone mit Salzzuschlag lässt sich unabhängig vom Bindemittelsystem mit einem mathematischen Formelapparat beschreiben. Der Erhärtungsprozess wird in seiner thermischen und seiner mechanischen Auswirkung beschrieben. Das thermische Verhalten entspricht einem einphasigen System. Im Vergleich mit In-situ-Versuchen zeigt sich eine Übereinstimmung, die im Temperaturmaximum nur wenige Kelvin Differenz aufweisen. Z. T. ist diese Abweichung auf die Abbildung des konvektiven Wärmetransports, die Unschärfe bei der Simulation des Verfüllprozesses und der Sensorlokationen zurückzuführen. Eine im gemessenen Verhalten erkennbare Phasennachreaktion kann in das Modell integriert werden. Für eine Systembewertung wird die fehlende Berücksichtigung der Phasennachreaktion als konservativ angesehen. Erste thermische Betrachtungen einer neuen Rezeptur, Sorelbeton Mo1, zeigen, dass das Stoffmodell auch hier anwendbar ist.

Die Beschreibung des mechanischen Verhaltens ist eine Kombination aus elastischem, plastischem, autogenem und viskosen Teilprozessen, wobei sich die viskosen Teilprozesse noch in weitere unterteilen. Jeder einzelne dieser Prozesse ist zumindest von der Erhärtung beeinflusst und mit Ausnahme des autogenen Prozesses auch von der Spannung.

Die Parameteranpassung erfolgt anhand verfügbarer Laborversuche. Eine Validierung anhand von in-situ-Versuchen zeigt eine gute Übereinstimmung im thermischen Verhalten, größere Abweichungen bestehen noch im mechanischen Verhalten, was einerseits auf den Unterschied in der Herstellung im Labor gegenüber der in einer großtechnischen Anlage gesehen wird und andererseits in bisher noch nicht ausreichend berücksichtigten mechanischen Prozessen. So ist eine Verbesserung im schädigungsfreien rheologischen Teil vorzunehmen. Auch wenn daher die Abbildungsqualität im mechanischen Teil nicht die vergleichbare Güte wie im thermischen Teil erreicht, kann der Nachweis der Rissbeschränkung aufgrund der hohen Festigkeit des SB A1 bereits geführt werden.

Allerdings ergeben sich für den aktuellen Stand des Modells noch Abweichungen in den Spannungsspitzen während der unmittelbaren Bauzuständen in der Größe des Faktors 2-4. Wie auf der thermischen Seite ist eine Phasennachreaktion erkennbar, deren ausstehende Berücksichtigung in einer Bewertung als konservativ angesehen wird. Trotz des Faktors in den Spannungsspitzen kann bereits eine Rissbewertung erfolgreich geführt werden.

Bereits identifizierte Prozesse können in Abhängigkeit der Aufgabenstellung (Systemverständnis, Prognose, Nachweis) genutzt werden, um das Stoffmodell zu ergänzen oder zu verfeinern. Die Ausweitung auf hydraulische Fragestellungen ist differenzierter zu betrachten. Aber auch im aktuellen Stand wird das Stoffmodell für Auslegungsberechnungen und Prognosen eingesetzt.

Literatur

- [BYF 80] Byfors, J.: Plain concrete at early ages. CBI forskning research 3:80. Stockholm: Cement- och betonginstitutet, 1980.
- [ENG 03] Engelhardt, H.-J. et al.: A Constitutive Law of Salt Concrete used for Closure of an LILW-Repository. In: ASME [Hrsg.]: ICEM '03: Conference Proceedings of the International Conference on Radioactive Waste Management and Environmental Remediation. 21.–25.09.2003, Oxford, England.
- [FRE 77] Freiesleben Hansen, P. & Pedersen, E. J.: Måleinstrument til kontrol af betons hærkning. Nordisk Betong, Nr. 1, 1977.
- [HEY 15] Heydorn, M. et al.: Schachtanlage Asse II - Anwendungsversuch Pilotströmungsbarriere PSB A1. In: [PTK 15]
- [JON 95] Jonasson, J. E., Groth, P. & Hedlund, H.: Modeling of Temperature and Moisture Field in Concrete to Study Early Age Movements as a Basis for Stress Analysis. In: R. Springenschmid [Hrsg.]: Thermal Cracking in Concrete at Early Ages: Proceedings of the International RILEM Symposium. London: CRC. 1994
- [MÜL 21] Müller-Hoeppe, N. & Lerch, C.: UVERSTOFF - Untersuchungen zur Vervollständigung von Stoffmodellen für Salz- oder Sorelbeton sowie spezieller low-ph und hochdichter bzw. hochfester Betone zum rechnerischen Nachweis der Rissbeschränkung für Bauwerke. BGE TEC 2021-18. Peine: BGE TECHNOLOGY, 2021.
- [ESA 18] ERCOSPLAN Ingenieurgesellschaft Geotechnik und Bergbau mbH, TU Bergakademie Freiberg, Institut für Gebirgsmechanik, Schachtanlage Asse II: Nachweis der Langzeitbeständigkeit für den Sorelbaustoff der Rezeptur A1, BGE (2018).

- [PTK 15] PTKA [Hrsg.]: Endlagerforschung - Fachgespräch "Verschlussysteme – In-situ-Bauwerke aus Magnesiabaustoff und dessen chemisch-mechanischen Eigenschaften im Hinblick auf HAW-Endlager“ Freiberg, 28.-29.04.2015 - Materialienband. https://www.ptka.kit.edu/ptka-alt/downloads/ptka-wte-e/FG_Verschluss_2015_Vortraege_Web-Version.pdf
- [POL 06] Polster, M.; Engelhardt, H.-J. & Heydorn, M.: Entwicklung eines Materialmodells für Magnesiabinder. In: Stark, J. & Fischer, H-B. [Hrsg]: Tagungsbericht Ibausil, 16. Internationale Baustofftagung, 20. - 23. September 2006, Weimar - Bd. 1. Weimar: Bauhaus-Univ. Weimar, 2006.
- [POL 23] Polster, M. et al.: Numerische Umsetzung des Abbindeverhaltens erhärtender Baustoffe. Präsentation i. R. d. Workshops „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“ des Arbeitskreises Betonkorrosion (AKB) des DAEF, 05. - 07. September 2023, Braunschweig. <https://www.bge-technology.de/mediathek/vortraege-und-veroeffentlichungen/>

Bedeutung der geotechnischen Barrieren im Safety Case: Sicherheitskonzepte und die Darstellung des sicheren Einschlusses im einschlusswirksamen Gebirgsbereich

¹ GRS gGmbH, Braunschweig, Deutschland, Email: jens.wolf@grs.de

² NU, Wettingen, Schweiz, Email: m.niemeyer@niemeyer.gmbh

³ BGE, Salzgitter, Deutschland, Email: jonathan.kindlein@bge.de

Zusammenfassung

Radioaktive Abfälle in Endlagern sind gemäß regulatorischen Vorgaben für lange Zeiträume in einem ewG zu konzentrieren und sicher einzuschließen. Im Sicherheitskonzept wird dargelegt, wie im Zusammenwirken der natürlichen Gegebenheiten, Prozesse und technischen Maßnahmen die Sicherheit des Endlagers gewährleistet ist. Aus dem Sicherheitskonzept werden konkrete Anforderungen an die Endlagerauslegung abgeleitet. Dabei spielen die geotechnischen Barrieren eine zentrale Rolle, da sie die unvermeidbare Durchörterung der geologischen Barriere abdichten müssen. Im Salinar werden bevorzugt Verschlussbauwerke aus Salz- und Sorelbeton sowie Salzgrusversatz eingesetzt. Zentrale Randbedingung der Funktionsweise der Verschlussbauwerke sind im Salinar die durch das Kriechverhalten des Steinsalzes bedingte Konvergenz (an den Verschlussbauwerken und deren Kontaktzone) sowie durch die Konvergenz bewirkte weitgehende Kompaktion des Salzgrusversatzes. Wichtigste Randbedingungen sind dabei der Gebirgsdruck, die Temperatur und der Feuchtegehalt im System.

Einleitung

Kern des methodischen Vorgehens der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle ist gemäß den nationalen Regularien (EndlSiAnfV, EndlSIUntV, StandAG) das Ziel, die einzulagernden radioaktiven Abfälle im Endlagersystem zu konzentrieren und sicher einzuschließen und damit die im Endlager enthaltenen Radionuklide mindestens im Bewertungszeitraum von einer Million Jahre von der Biosphäre fernzuhalten. Zur Darstellung und Prüfung dieser Vorgabe sind wesentliche Barrieren zu definieren, auf denen die Konzentration und der sichere Einschluss der radioaktiven Abfälle beruht.

Gemäß den EndlSiAnfV sind zwei generelle Konzepte wesentlicher Barrieren möglich:

1. ein oder mehrere einschlusswirksame Gebirgsbereiche (ewG)⁷ oder
2. im Fall des Wirtsgesteins Kristallingestein, sofern kein ewG ausgewiesen werden kann, für die jeweilige geologische Umgebung geeignete technische und geotechnische Barrieren.

Im letzteren Fall (Endlagersystemtyp 2 in /BGE 22/) ist die Bedeutung der geotechnischen Barrieren (Versatz und Verschlussmaterialien bzw. entsprechend aus diesen aufgebaute Verschlussbauwerke) als Bestandteil der wesentlichen Barrieren evident, auch wenn in diesem Konzept der sichere Einschluss vorrangig auf technischen Barrieren (Behälter) beruhen wird.

⁷ Gemäß § 2 EndlSiAnfV ist der ewG der Teil eines Gebirges, der bei Endlagersystemen, die wesentlich auf geologischen Barrieren beruhen, im Zusammenwirken mit den technischen und geotechnischen Verschlüssen den sicheren Einschluss der radioaktiven Abfälle in einem Endlager gewährleistet.

Dieser Beitrag konzentriert sich auf das erste Konzept (im Folgenden als ewG-Konzept bezeichnet, auch Endlagersystemtyp 1 in /BGE 22/) und beleuchtet die Fragestellung, welche Bedeutung die geotechnischen Barrieren haben, wenn die wesentliche Barriere ein ewG ist. Dabei wird im Folgenden davon ausgegangen, dass im jeweiligen Wirtsgestein ein einzelner ewG ausgewiesen werden kann, der ausreichend groß ist, die in Deutschland anfallenden hochradioaktiven Abfälle aufzunehmen. Für diesen Fall sind in § 5 EndlSiAnfV die entsprechenden Anforderungen definiert. Neben den Anforderungen an die geologische Barriere wird hinsichtlich der geotechnischen Barrieren in § 5 gefordert:

1. Es ist zu prüfen und darzustellen, dass die für den sicheren Einschluss der radioaktiven Abfälle relevanten Eigenschaften der technischen und geotechnischen Barrieren mindestens in dem Zeitraum erhalten bleiben, in dem diese Barrieren nach dem Sicherheitskonzept erforderlich sind.
2. Die für die Langzeitsicherheit erforderlichen Eigenschaften von technischen oder geotechnischen Barrieren sind im Sicherheitskonzept zu spezifizieren. Es ist zu prüfen und darzustellen, dass die Herstellung und Errichtung der Barrieren nach diesen Spezifikationen in der erforderlichen Anzahl qualitätsgesichert möglich sind. Die vorgesehene Qualitätssicherung muss dem Stand von Wissenschaft und Technik entsprechen. Die Herstellung, die Errichtung und die Funktion der Barrieren müssen erfolgreich erprobt sein, soweit ihre Robustheit nicht anderweitig nachgewiesen werden kann und keine Sicherheitsreserven in einem Umfang bestehen, die den Verzicht auf eine Erprobung erlauben.

Diese Anforderungen zeigen, dass ein Sicherheitskonzept zu erstellen ist, das ausweist, welche geotechnischen Barrieren zur Erreichung eines sicheren Einschlusses notwendig sind und welche Sicherheitsfunktion(en) ihnen zugewiesen werden, d.h. wann sie mit welchen Eigenschaften im Zusammenspiel mit der geologischen Barriere wirken müssen.

Die Anforderungen aus § 5 EndlSiAnfV finden sich konsequenterweise bei den Anforderungen zum Sicherheitskonzept in § 10 EndlSiAnfV wieder: Dort heißt es, dass das Sicherheitskonzept eine Darstellung aller vorgesehenen Barrieren des Endlagersystems, insbesondere der wesentlichen Barrieren, ihrer jeweiligen Sicherheitsfunktionen und ihres Zusammenwirkens, enthalten muss. Diese Darstellung muss auch ein Verschlusskonzept zur Abdichtung von Hohlräumen, die mit radioaktiven Abfällen beladen worden sind, umfassen.

Der Beitrag stellt im Folgenden die Bedeutung geotechnischer Barrieren in den Sicherheitskonzepten für Endlagersystem mit einem ewG im Salinar heraus und zeigt den Einfluss der geotechnischen Barrieren bei der Prüfung und Darstellung des sicheren Einschlusses auf.

Sicherheitskonzepte für ewG-Konzepte im Salinar

Basis für die Erstellung des Sicherheitskonzeptes sind gemäß § 10 EndlSiAnfV die zu erwartenden Entwicklungen (zeE) des Endlagersystems im Bewertungszeitraum. Die abweichenden Entwicklungen (aE) sind einzubeziehen. Das bedeutet, dass die möglichen (plausiblen) Entwicklungen zum Zeitpunkt der Erstellung eines Sicherheitskonzept bekannt sein müssen. Um diese Anforderung erfüllen zu können, wird das Sicherheitskonzept und die technische Auslegung des Endlagers in einem iterativen Verfahren weiterentwickelt und dabei die abzuleitenden zeE und aE konkretisiert und deren Konsequenzen analysiert. Ist die Sicherheit des Endlagers gewährleistet, d.h. die geforderten Grenzwerte insbesondere zur Dosisbegrenzung und zum Stoffmengenaustrag eingehalten sind, ist eine weitere Verbesserung (Optimierung) des Sicherheitskonzeptes und der technischen Auslegung gefordert (§ 12 EndlSiAnfV). Das iterative Verfahren und die Optimierung wird im deutschen Verfahren durch die verschiedenen Stufen der vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen (vSU) dokumentiert. Die Detailtiefe entspricht dabei den Möglichkeiten und Erfordernissen der jeweiligen Phase des Standortauswahlverfahrens. Für den allerersten Schritt der vSU, den repräsentativen vSU, stellt die Darstellung dieses iterativen Vorgehens eine besondere Herausforderung dar, da zu Beginn weder zeE und aE noch vorläufige Sicherheitskonzepte oder eine vorläufige technische Auslegung vorliegen /BGE 22/.

Kern eines Sicherheitskonzeptes ist die Beschreibung der Maßnahmen zur Erreichung der Konzentration und des sicheren Einschlusses der hochradioaktiven Abfälle und enthält darauf aufbauend eine Darstellung der natürlich vorhandenen und aller geotechnischen Barrieren des Endlagersystems. Dabei werden für die einzelnen Komponenten des Endlagersystems deren Sicherheitsfunktionen und die damit im Zusammenhang stehenden erforderlichen Eigenschaften beschrieben.

Sicherheitskonzepte für Endlager für hochradioaktive Abfälle im Salinar sind in /MOE 12/, /KIN 18/, /BER 20a/ und /BER 20b/ dargestellt. Ein generelles Sicherheitskonzept für das ewG-Konzept (Endlagersystemtyp 1) ist in /BGE 22/ enthalten. Nach diesen Sicherheitskonzepten soll primär die geologische Barriere die Konzentration und den Einschluss der hochradioaktiven Abfälle nachsorgefrei und dauerhaft sicherstellen. Wesentlich für die dauerhafte Einschlusswirkung eines Endlagers im Salzgestein ist die mindestens 100 m mächtige geologische Barriere im ewG mit ihrer praktischen Dichtheit gegenüber Fluiden. Dazu muss die langfristige Integrität der geologischen Barriere sichergestellt sein, was durch die Eigenschaften des Steinsalzes im ewG gewährleistet werden muss. Vor der Einlagerung der Abfälle muss allerdings ein Endlagerbergwerk aufgefahren werden, wobei die geologische Barriere durchörtert wird. Bereits während der Auffahrung, aber insbesondere während der Betriebsphase führt das mechanische Verhalten des Steinsalzes zu einer fortschreitenden Auflockerung des Gebirges im Umfeld der Schächte, Strecken und Hohlräume. Über sehr lange Zeiträume hinweg würden diese Hohlräume zukriechen (Konvergenz) und anschließend auch die Auflockerungszonen geschlossen. Um möglichst bald nach der Einlagerung der Abfälle hydraulische Widerstände zu erzeugen und die fortschreitende Auflockerung des Gebirges zu beenden, werden die Hohlräume mit dem bei der Auffahrung anfallende Salzgrus verfüllt. Durch die Konvergenz wird der Salzgrusversatz kompaktiert, wobei seine Porosität abnimmt und die mechanische Stützwirkung auf das Gebirge ansteigt. Dadurch entfaltet der Versatz zusammen mit dem Gebirge im Laufe der Zeit eine sehr hohe Dichtwirkung, die sicherstellt, dass auch über die verfüllten Bergwerksauffahrungen der sichere Einschluss der Abfälle gewährleistet ist.

Die bis zum Erreichen einer entsprechenden Dichtheit erforderlichen Zeiträume liegen je nach Konvergenzrate, Feuchtegehalt und der durch die Wärmeentwicklung der Abfälle großräumig erhöhten Temperatur zwischen einigen zehn bis einigen tausend Jahren /MOE 12/. Deshalb sind zusätzlich geotechnische Verschlussbauwerke wie Schacht- und Streckenverschlüsse notwendig, die sofort nach Verschluss des Endlagers eine spezifizierte Dichtwirkung aufweisen. Dabei soll insbesondere bereits ab dem Zeitpunkt des Verschlusses des Endlagers ein Zutritt von Deckgebirgs- und Formationswässern zu den Einlagerungsbereichen verhindert werden oder hinreichend klein sein. Wie beim Versatz, bei dem man arteigenes Material verwendet, ist zu beachten, dass kompatibles Material zum Bau- der Verschlussbauwerke verwendet wird. Im Wirtsgestein Salz haben sich besonders Salz- und Sorelbeton als geeignete Baustoffe herausgestellt, für die Schächte empfehlen sich Dichtelemente aus mit Bitumen vergossenem Schotter /HER 20/.

Die Verschlussbauwerke sind in der Nachverschlussphase Einwirkungen und Alterationsprozessen ausgesetzt, so dass die uneingeschränkte Wirksamkeit dieser Verschlussbauwerke nicht über den gesamten Bewertungszeitraum gegeben ist. Die Verschlussbauwerke müssen aber mindestens so lange hinreichend dicht sein, bis der hydraulische Widerstand des Versatzstoffes groß genug ist, um ein Vordringen von Lösungen zu den Abfällen zu verhindern bzw. so weit zu begrenzen, dass der sichere Einschluss erreicht wird.

Neben den wesentlichen Barrieren tragen weitere Barrieren zum Einschluss der Abfälle bei, indem sie die Freisetzung von Radionukliden aus dem ewG verhindern bzw. behindern. So verzögern z.B. die Endlagerbehälter und die Abfallmatrix im Falle eines Lösungszutritts die Freisetzung von Radionukliden aus den Abfällen.

In Abb. 1 ist schematisch dargestellt, wie die einzelnen Barrieren in der Nachverschlussphase zeitlich wirken und sich in ihrer Wirkung ergänzen. Der Zeitpunkt $t = 0$ entspricht dem Zeitpunkt, zu dem das Endlagerbergwerk verschlossen wird. Die Farbintensität spiegelt für die einzelnen Barrieren jeweils die Zu- bzw. Abnahme ihrer Barrierenwirkung wider. Die auf der logarithmischen Zeitskala dargestellten Zeitmarken dienen dabei nur einer groben Orientierung und stellen keine Anforderungen oder Vorgaben dar.

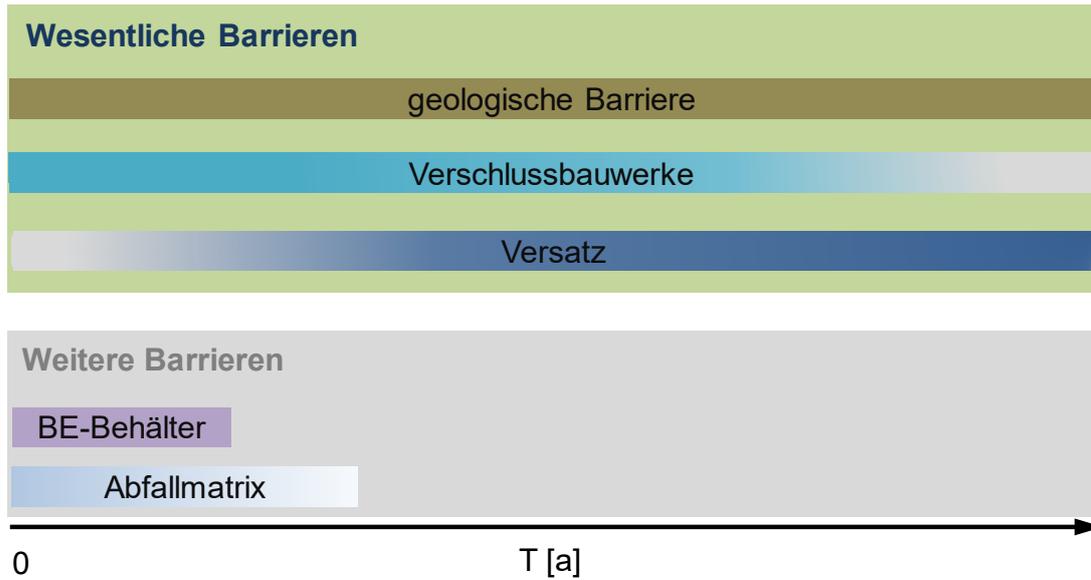


Abb. 1 Zusammenspiel der wesentlichen und weiteren Barrieren am Beispiel eines Endlagers für hochradioaktiver Abfälle im Steinsalz (in Anlehnung an /MOE 12/)

Welche Verschlussbauwerke als wesentliche Barriere zu definieren sind, hängt von der Ausweisung des ewG und dem gewählten Zugang zum Endlagerbergwerk ab. So können Konzepte mit Streckenabdichtungen aber auch eine Kombination von Streckenabdichtungen und Schachtverschlüssen notwendig sein.

Dieses Sicherheitskonzept, das für neuaufzufahrende Endlager für hochradioaktive Abfälle entwickelt wurde, kann auch auf Endlager für schwach- und mittelradioaktive Abfälle in Altbergwerken wie z.B. dem Endlager für radioaktive Abfälle (ERAM) übertragen werden. In Anlehnung an den ewG-Gedanken können im Salinar des ERAM Bereiche mit Einschlusswirkung (BmEw) um die eingelagerten Abfälle ausgewiesen werden. Zur Sicherstellung der Einschlusswirkung der entsprechenden Gebirgsbereiche sind wie im o.g. Sicherheitskonzept für hochradioaktive Abfälle Verschlussbauwerke notwendig. Diese sind aufgrund der durch den Bergbau erfolgten Durchörterung des Salinars allerdings weitaus zahlreicher, als dies für ein neuaufzufahrendes Endlager zu erwarten ist (siehe Abb. 2). Die BmEw in Verbindung mit den Schacht- und Streckenabdichtungen sind die wesentlichen Barrieren und bewirken, dass die eingebrachten Stoffe im ERAM weitestgehend am Ort ihrer ursprünglichen Einlagerung bzw. Einbringung verbleiben.

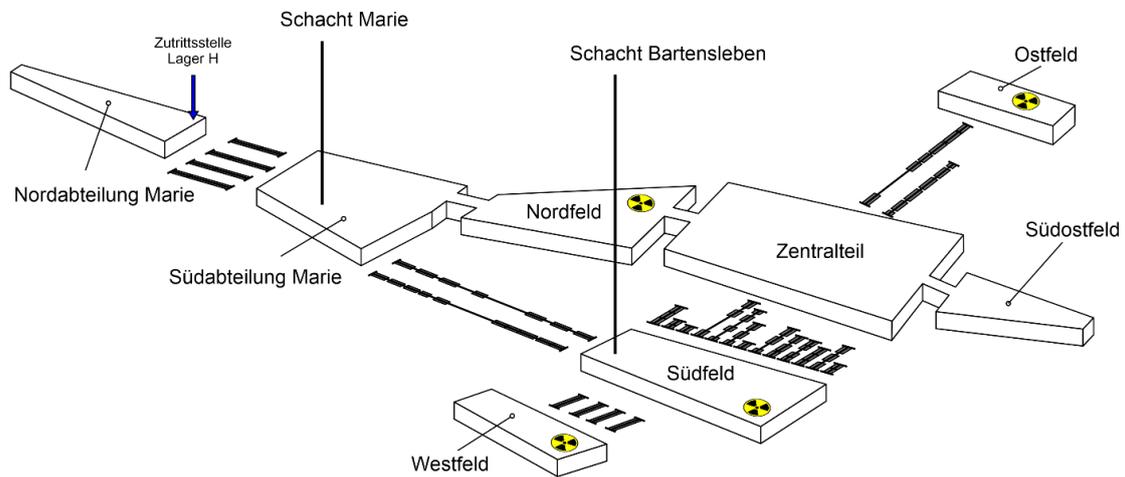


Abb. 2 Schematische Darstellung der Anordnung von Streckenabdichtungen im ERAM /BGE 23/

Prüfung und Darstellung des sicheren Einschlusses

Die Prüfung und Darstellung des sicheren Einschlusses erfolgt für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle anhand der Anforderungen in § 4 EndlSiAnfV. Demnach ist für die zeE zu prüfen und darzustellen, dass im Bewertungszeitraum

1. insgesamt höchstens ein Anteil von 10^{-4} und
2. jährlich höchstens ein Anteil von 10^{-9}

sowohl der Masse als auch der Anzahl der Atome aller ursprünglich eingelagerten Radionuklide aus dem Bereich der wesentlichen Barrieren ausgetragen werden. Für die aE ist zu prüfen und darzustellen, dass das Endlagersystem im Bewertungszeitraum seine Funktion beibehält. Da es sich bei diesen Anforderungen um Verhältniszahlen (im Verhältnis zur Menge des eingelagerten Inventars) handelt, sind diese Indikatoren als Performanceindikatoren der wesentlichen Barrieren anzusehen. Die eigentliche Prüfung der Sicherheit erfolgt anhand der Dosisabschätzung nach § 7 EndlSiAnfV.

Damit diese Anforderung erfüllt werden kann, ist ein Sicherheitskonzept vorstellbar, bei dem die geotechnischen Verschlussbauwerken als schnell wirksame Barrieren im Verbund mit dem ewG den Einschluss der Abfälle in dem Zeitraum, in dem der Salzgrusversatz seine Dichtwirkung noch nicht entfaltet, sicherstellen. Die Integrität der Verschlussbauwerke muss deshalb mindestens über den Zeitraum gegeben sein, in dem der Salzgrusversatz in den Zugangsstrecken der Einlagerungsbereiche noch keine ausreichende Dichtfunktion übernimmt (siehe Abb. 2). Die Anforderung an ein geotechnisches Verschlussbauwerk ist dann erfüllt, wenn der vorgegebene hydraulische Widerstand des Verschlusses, inklusive der Kontakt- und Auflockerungszone, sowie die Integrität des Baukörpers über die gemäß Sicherheitskonzept vorgesehene Funktionsdauer gegeben sind.

Aufgrund des Wärmeeintrags in das Steinsalz durch die Einlagerung hochradioaktiver Abfälle kommt es in den ersten paar tausend Jahren zu Temperaturentwicklungen um die eingelagerten Abfälle, die relevante geomechanische Lastfälle für die geotechnischen Verschlussbauwerke darstellen. Langfristig können vor allem chemische Veränderungen des Baukörpers die Integrität eines Verschlussbauwerkes beeinträchtigen. Systematisch können Lastfälle aus Katalogen von Merkmalen, Ereignissen und Prozesse (engl. features, events and processes, kurz FEP) und deren Interaktion mit den wesentlichen Barrieren abgeleitet werden. Wichtige FEP mit entsprechender potenzieller Einwirkung auf Schacht- oder Streckenverschlüsse sind beispielsweise:

- Erdbeben;
- Chemische und mikrobielle Alteration (Korrosions- oder Umwandlungsprozesse in Abhängigkeit des verwendeten Materials);
- Konvergenz und Spannungsänderungen;
- Thermische Expansion oder Kontraktion;
- Kanalisierung im Verschlussmaterial;
- Diapirismus (bei Salz in steiler Lagerung);
- Klimatische Prozesse in Abhängigkeit von Teufe des ewG und Lokation des Endlagersystems, vor allem glazigene Rinnenbildung, Subrosion und Permafrost.

Ein wichtiger Bestandteil der Auslegung der Verschlussbauwerke sind Modellrechnungen, bei denen die o.g. einwirkenden Prozesse berücksichtigt werden. Mit Rechnungen zur Ermittlung der Auslegungsanforderungen wird u. a. der Zeitpunkt ermittelt, ab dem der durch den Kompaktionsvorgang infolge von Salzkriechen verdichtete Salzgrus eine ausreichend hohe hydraulische Dichtwirkung erreicht, um einen Zutritt von nennenswerten Lösungsmengen zu den Abfällen zu verhindern. Bis zu diesem Zeitpunkt muss die Integrität der Verschlussbauwerke gewährleistet sein. Auf der Grundlage des heutigen Kenntnisstandes wird davon ausgegangen, dass unter Endlagerbedingungen in einem Zeitraum kleiner als 1.000 Jahre, also deutlich kürzer als die Funktionsdauer der Verschlussbauwerke, sehr kleine Porositätswerte (1 %) erreichbar sind, bei denen der Versatz als hydraulisch undurchlässig angesehen werden kann /FRI 23/.

Literatur

- /BER 20a/ Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Eickemeier, R., Fahland, S., Flügge, J., Frenzel, B., Hammer, J., Kindlein, J., Liu, W., Maßmann, J., Mayer, K.-M., Mönig, J., Mrugalla, S., Müller-Hoeppe, N., Reinhold, K., Rübel, A., Schubart-Engelschall, N., Simo, E., Thiedau, J., Thiemeyer, T., Weber, J. R., Wolf, J. (2020): Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in steil lagernden Salzformationen - Abschlussbericht. RESUS. GRS-569. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) GmbH, BGE TECHNOLOGY GmbH, Bundesanstalt für Geologie und Rohstoffe (BGR). Braunschweig.
- /BER 20b/ Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Eickemeier, R., Fahland, S., Flügge, J., Frenzel, B., Hammer, J., Kindlein, J., Liu, W., Maßmann, J., Mayer, K.-M., Mönig, J., Mrugalla, S., Müller-Hoeppe, N., Reinhold, K., Rübel, A., Schubarth-Engelschall, N., Simo, E., Thiedau, J., Thiemeyer, T., Weber, J. R., Wolf, J. (2020): Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in flach lagernden Salzformationen bei einer höheren Auslegungstemperatur. RESUS. GRS-570. BGE TECHNOLOGY GmbH, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH. Braunschweig.
- /BGE 22/ Methodenbeschreibung zur Durchführung der repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen gemäß Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung. Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH, Peine.
- /BGE 23/ Planfeststellungsverfahren zur Stilllegung des ERA Morsleben: Sicherheitskonzept und Ableitung der Stilllegungsmaßnahmen. Bericht, unveröffentlicht, Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH, Peine.
- /FRI 23/ Friedenber, L. et al. (2023). Compaction of crushed salt for safe containment: Overview of Phase 2 of the KOMPASS project. In American Rock Mechanics Association (Chair), 57th U.S. Rock Mechanics / Geomechanics Symposium. Symposium conducted at the meeting of American Rock Mechanics Association (ARMA), Atlanta.

Kap. 1.17 – Bedeutung der geotechnischen Barrieren im Safety Case: Sicherheitskonzepte und die Darstellung des sicheren Einschlusses im einschlusswirksamen Gebirgsbereich

/HER 20/ Herold, P., Gruner, M., Jobmann, M., Kudla, W., Müller, C. (2021): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse im Ton- und Salzgestein. Bericht zum Vorhaben ELSA-II, FKZ 02E11193B. BGE TEC 2020-11, BGE Technology, Peine.

/MOE 12/ Mönig, J., Buhmann, D., Rübél, A., Wolf, J., Baltés, B., Fischer-Appelt, K. (2012): Sicherheits- und Nachweiskonzept, Bericht zum Arbeitspaket 4, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. GRS-277, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln.

/KIN 18/ Kindlein, J., Buhmann, D., Mönig, J., Spießl, S., Wolf, J. (2018): Bewertung der Wirksamkeit des Radionuklideinschlusses für ein Endlager in flach lagernden Salzformationen - Ergebnisse aus dem Vorhaben KOSINA. FKZ 02E11405A, GRS-496, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig.

2

Tagungsbeiträge – Foliensätze

- 2.1 H.-J. Engelhardt, M. Heidmann-Ruhz, L. von Borstel, H. Räuschel, F. Rempel und A. Carstensen: **Strategie zur Entwicklung von Baustoffen**



STRATEGIE DER ENTWICKLUNG VON BAUSTOFFEN

Eine Grundlage für die erfolgreiche Durchführung von Verfüll- und Abdichtmaßnahmen



01

ÜBERSICHT ERFORDERLICHER BAUSTOFFE

02

ZIELE DER BAUSTOFFENTWICKLUNG

03

DAS ARBEITSPROGRAMM

04

ANFORDERUNGEN UND PRÜF-/TESTKRITERIEN

05

ZUSAMMENFASSUNG



BAUSTOFFÜBERSICHT

01

WELCHE BAUSTOFFE WURDEN ENTWICKELT?



- Schüttgüter, fließfähige/selbsterhärtende Baustoffe, Spritzbetone/-mörtel, Stückgüter

In Bezug auf den Einsatzzweck:

Injektionsmittel, Bohrlochverfüllmaterialien, Widerlagerbaustoffe,
hydraulisch oder chemisch wirkende Abdicht-/Barrierebaustoffe, Verfüllmaterialien,
Baustoffe bevorzugter Fließwege
Ausbauten, Schalungen, Baustoffe für den Fahrbahnbau

In Bezug auf die Korngröße:

partikelfreie Injektionsmittel, Feinkornsuspensionen, Mörtel, Betone



BAUSTOFFENTWICKLUNG

ZIELE DER

02

ZIELE DER BAUSTOFFENTWICKLUNG



Herleitung einer Baustoffzusammensetzung,

die es erlaubt das Bauwerk entsprechend der geforderten Qualität zu bauen
unter den jeweiligen Rahmenbedingungen
in der gewünschten Zeit und im geforderten Kostenrahmen

Erhalt von Informationen für die spätere Qualitätssicherung/Qualitätskontrolle
z.B. Festlegung von Prüfverfahren/-methoden

Ermittlung von Abhängigkeiten

Zusammensetzung Ausgangsstoffe / Baustoffeigenschaften

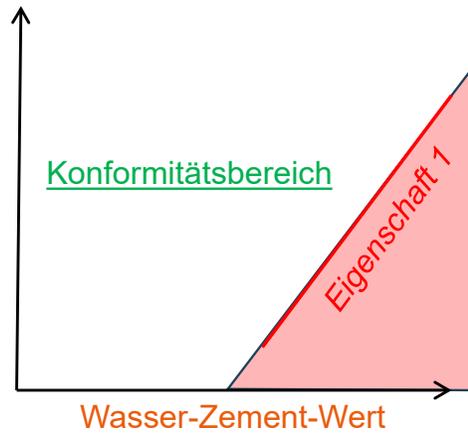
Rezeptur / Baustoffeigenschaften

Eigenschaften untereinander

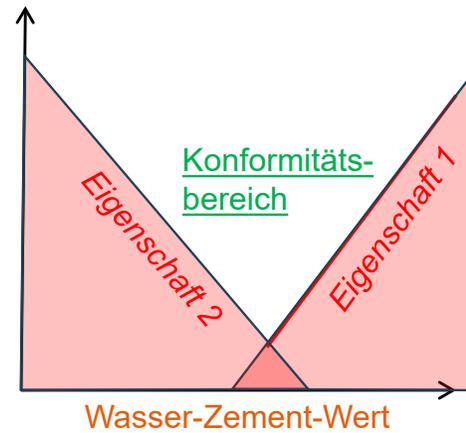
ZIELE DER BAUSTOFFENTWICKLUNG

Herleitung von Konformitätsbereichen zu Anforderungen

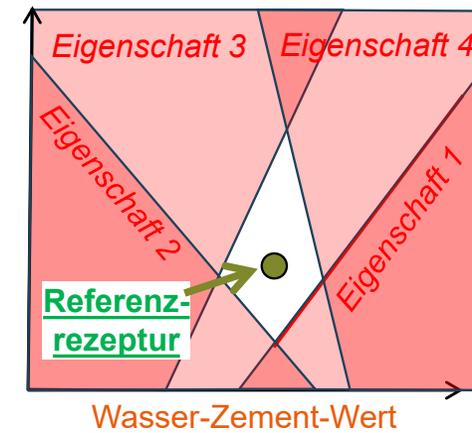
Zusatzstoff-Zement-Verhältnis



Zusatzstoff-Zement-Verhältnis

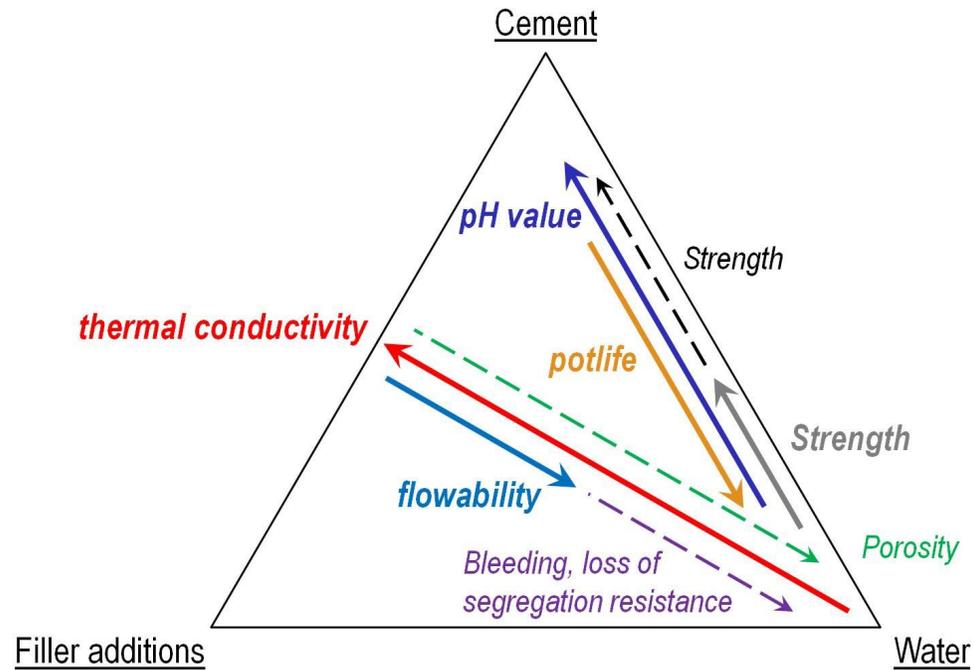


Zusatzstoff-Zement-Verhältnis



ZIELE DER BAUSTOFFENTWICKLUNG

Auch der beste Baustoff ist ein Kompromiss!



A yellow spider crane is positioned in a quarry, with its boom extended upwards. A worker is visible in a basket at the end of the boom. The background shows a large, rocky quarry face.

DAS ARBEITSPROGRAMM

03

DAS ARBEITSPROGRAMM



Auswahl der Ausgangsstoffe und damit des Baustoffsystems

Sorelbaustoffe, Salzbetone, Salzgrus,

- Kenntnisse bekannter Baustoffe (Baustoffrezepturen) nutzen

Jedes Baustoffsystem hat charakteristische Eigenschaften

Einsatz im Salinar erfordert bei Abdicht- und Verfüllmaterialien einen Salzanteil

- Bevorzugte Auswahl korrosionsstabiler Baustoffe

DAS ARBEITSPROGRAMM



Festlegung der Korngrößenverteilung

- Eindringverhalten in Hohlräume
- Rauheit des Gebirges – Baustoffrandzonen vermeiden
- thermische Spannungen
Verwendung von Gesteinskörnung. Anteil an Gesteinskörnung erhöhen.
Zur Begrenzung des Wasseranspruchs ist die Korngröße zu erhöhen.

**Anstieg der Korngröße vom Injektionsmittel
zum Verfüllbaustoff und Baustoff hydraulische Abdichtungen/Barrieren.**

DAS ARBEITSPROGRAMM FESTLEGUNG VON TESTMISCHUNGEN

Ausgangspunkt sind Rechnungen und bekannte Rezepturen

Vorteile:

Einfache Bewertung/Abschätzung von Eigenschaften

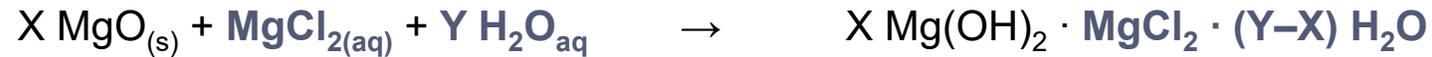
Vereinfachte Messdatenauswertung – Nutzung von Korrelationen (vgl. Baustofffamilien)

Reduzierung von Lieferketten und QS-Maßnahmen bei identischen Ausgangsstoffen

Rezeptur	MgO	Mg(OH) ₂	BaSO ₄	Salz	MgCl ₂ -Lösung
MFBBa-17/3/30	+	+	+		+
ETO-I	+		+	+	+
ERAM MO1	+		+	+	+
Sorelbeton A1	+			+	+
IM-ASSE-1	+			+	+

DAS ARBEITSPROGRAMM FESTLEGUNG VON TESTMISCHUNGEN

Bei Sorelbaustoffen ist die Anmischlösung ein Teil des Bindemittelsystem.



Sorelphase	Konzentration Anmischlösung	Molare Mengen		
		Mg(OH) ₂	MgCl ₂	H ₂ O
3-1-8		3	1	8
5-1-8		5	1	8
Bischofit			1	6 (< 8)
Anmischlösung	375 g/l	3,64	1	8,99
	400 g/l	3,47	1	8,30
	425 g/l	3,31	1	7,69
	450 g/l	3,17	1	7,15

DAS ARBEITSPROGRAMM FESTLEGUNG DER UNTERSUCHUNGEN



Welche Eigenschaften sind zu bestimmen?

- Untersuchungen der Ausgangsstoffe, z.B. chemisch-mineralogische Charakterisierung
- Untersuchungen zur Lager- und Transportfähigkeit
- Rheologische Untersuchungen
- Thermische Eigenschaften
- Festmaterialeigenschaften
 - Expansion/Kontraktion
 - Elastische Verformungen, Festigkeiten, Kompaktionsverhalten, Kriechen
- Reaktionsverhalten mit externen Gasen und Lösungen (Korrosionswiderstand)

DAS ARBEITSPROGRAMM REALITÄTSNÄHE DER UNTERSUCHUNGEN



Was kann die Eigenschaften beeinflussen (Maßstabeffekte/Technik)?

- Lagerungs- und Transportbedingungen, wie pneumatischer Transport von Ausgangsstoffen
- Dosiergenauigkeit
- Mischintensität und Rohrleitungstransport (Nachschereffekt)
- Entlüften beim Transport und beim Einbringen (Reduzierung der Luftporen)
- Entmischen der Bestandteile oder Verdichtung beim Freifall
- Fließvorgang (Fließwinkel)
- Verlust von Baustoff-/Drainagelösung
- Temperatur, Temperaturentwicklung
- Druckeinwirkung bei expandierenden Baustoffen (Erhärten unter Druck)

DAS ARBEITSPROGRAMM DIE GESTUFTE VORGEHENSWEISE

Rheologische Untersuchungen sind schneller durchführbar als Festmaterialuntersuchungen.





ANFORDERUNGEN UND PRÜF-/TESTKRITERIEN

04

FESTLEGUNG VON ANFORDERUNGEN



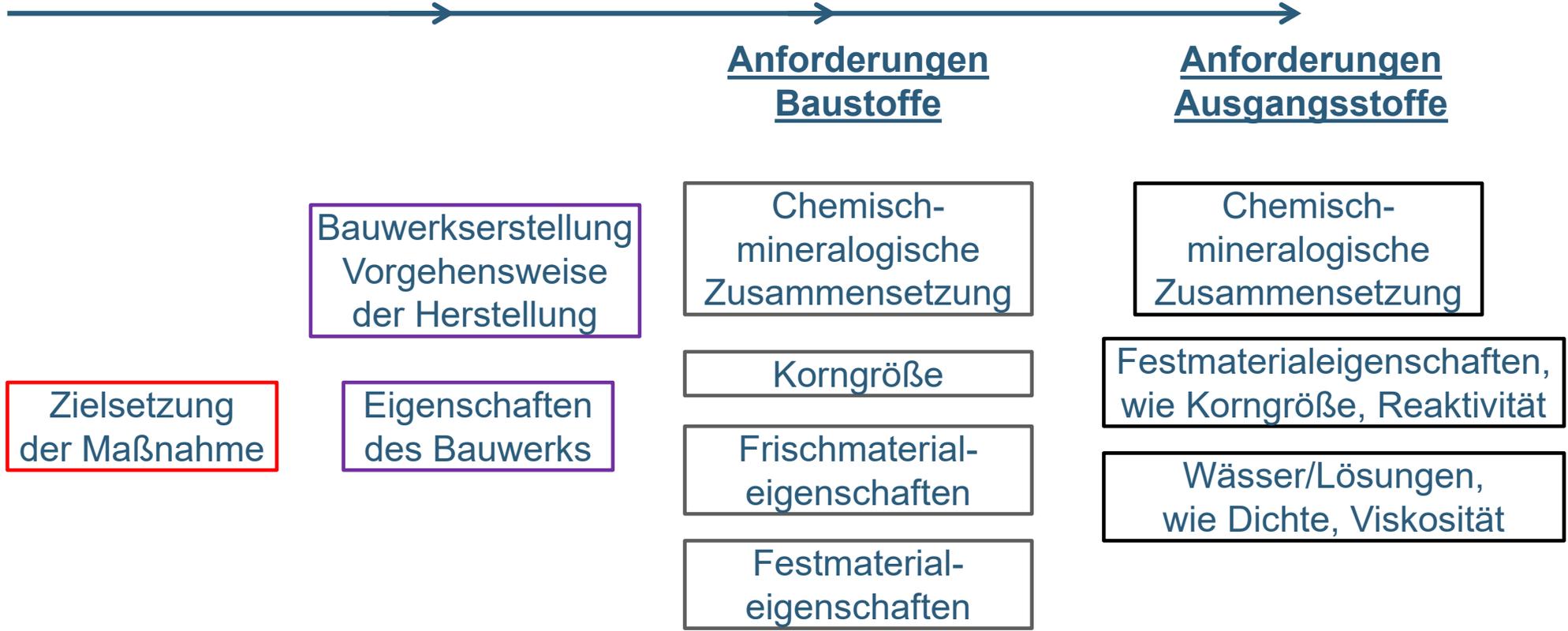
Anforderung: Grenzwert zu einer Eigenschaft mit Angabe des Prüf-/Testverfahrens

Grundanforderungen, z.B. gesetzliche Vorgaben

- 1) Arbeitssicherheit, Gesundheitsschutz
- 2) Transport und Lagerung
- 3) Verfügbarkeit in ausreichender Menge und Qualität
- 4) Wirtschaftliche Gesichtspunkte
- 5) Umweltaspekte

Vorteile bieten Ausgangsstoffe/Materialien, die die Baustoffindustrie verwendet
Vorhandensein eines Qualitätssicherungsprogramms

FESTLEGUNG VON ANFORDERUNGEN



FESTLEGUNG VON PRÜF-/TESTKRITERIEN



Die Konformität mit Anforderungen kann häufig nicht direkt geprüft werden.

Beispiele: Druckverlust bei der Rohrleitungsförderung, Verarbeitungszeit, Erhärtungsbeginn

Ermittlung geeigneter Testmethoden. Herleitung von Prüf-/Testkriterien,
wie Konsistenzprüfverfahren + Grenzwert

Labormessverfahren: Zitronensäurereaktivität bei MgO, BET-Oberfläche, etc.

Erhärtungsbeginn: Kalorimetermessungen

FESTLEGUNG VON PRÜF-/TESTKRITERIEN

Auswahlkriterien des Prüfverfahrens

- sachbezogenen Fließverfahren (Rohrleitungsförderung), Ausbreitverhalten (Verfüllprozess)
- Berücksichtigung der Baustoffeigenschaften (Wasserlöslichkeit, Korngröße)
- Zur Verfügung stehende Baustoffmenge
- Eindeutige Korrelation mit der Anforderung
- Genauigkeit, Reproduzierbarkeit und Sensitivität (geringe Querempfindlichkeit)
- Zeitdauer der Durchführung und Reinigungsaufwand

Hoher Bekanntheitsgrad und Akzeptanz

Durchführung nach oder in Anlehnung an Verfahren der Baustofftechnologie,
z.B. Normverfahren (DIN EN 12350 etc.)

AUSWERTUNG VON MESSBEFUNDEN



Zeitabhängigkeit der Eigenschaften

- Frischmaterialeigenschaften Thixotropie/chemische Reaktionen
- Hydratationsabhängigkeit der Festmaterialeigenschaften

⇒ Weitere Auswertung oder Interpretation erforderlich
(Anpassung von Funktionen)

Statistische Auswertung ist erforderlich, vgl. DIN EN 206

FESTLEGUNG VON PRÜF-/TESTKRITERIEN BEISPIEL: SEDIMENTATIONSTABILITÄT

Trennung der Grob- und Feinkornanteile → Inhomogenität des Festkörpers

„Drei-Zylinder-Test“:

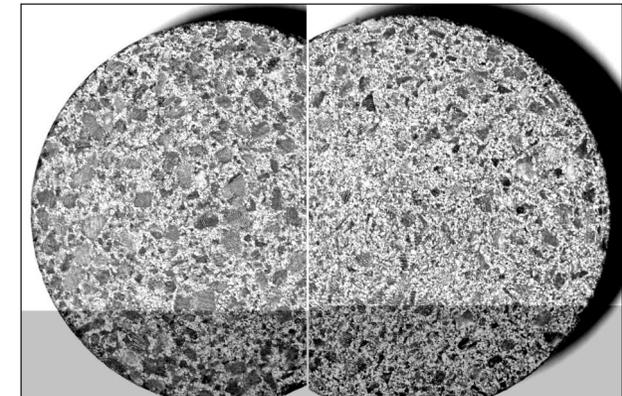
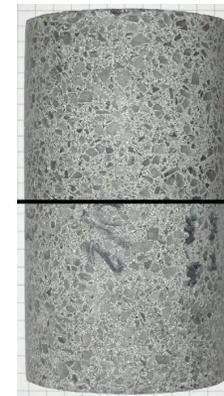
Bestimmung des Grobkornanteils in unterschiedlicher Höhe einer Füllsäule

Optische Bewertung der Schnittflächen von Probekörpern

Dichtebestimmung von Probekörperstücken

Berechnung der „Sedimentationsstabilen Korngröße“
mit Hilfe der Fließgrenze

Prüfung der Konformität mit der Anforderung
durch unabhängige Messverfahren



A yellow spider crane is positioned in a quarry, with its boom extended upwards. A worker is visible in a basket at the end of the boom. The background shows a large, rocky quarry face.

ZUSAMMENFASSUNG

05

ZUSAMMENFASSUNG



- Vorgehensweise der Entwicklung und Optimierung von Baustoffen ist bekannt
- Umfangreiche Kenntnisse zu Prüf-/Messverfahren liegen vor
- Es ist möglich zielgerichtet und effizient Baustoffe zu entwickeln
- Umfangreiches Spektrum an Baustoffrezepturen liegt für unterschiedliche Einsatzzwecke vor
- Zahlreiche Baustoffe haben sich unter in-situ-Einsatz bewährt, wie Injektionsmittel, Bohrlochverfüllmaterialien, Salzbetone und diverse Sorelbaustoffe
- Es stehen Referenzmaterialien für die Stilllegung ERAM zur Verfügung

Vielen Dank für die Aufmerksamkeit !



2.2

F. Rempel und A. Carstensen: **Übersicht über Baustoffuntersuchungen für Stilllegungsverfahren am Beispiel des Endlagers für radioaktive Abfälle Morsleben (ERAM)**



ZIELSTELLUNG (ERAM)

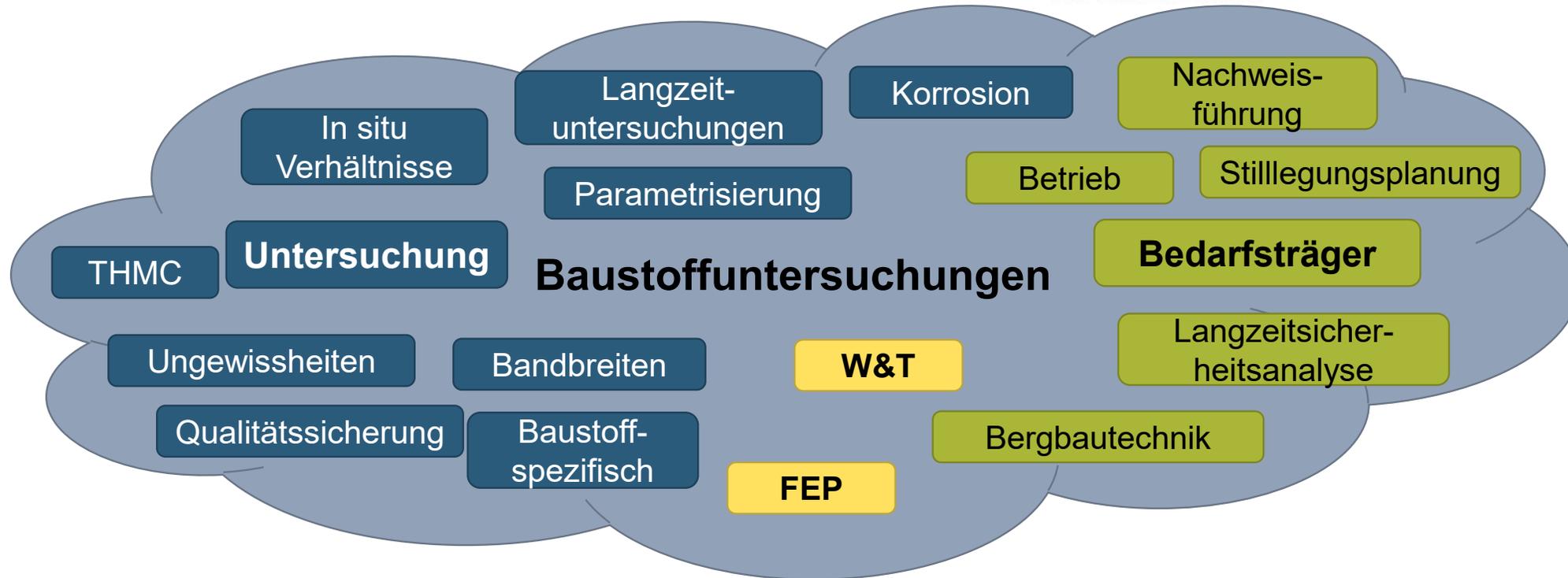


Konzentration und sicherer Einschluss durch geologische Barriere, geotechnischen Bauwerken und Versatz von Grubenbauen (robustes Barrieren-System).

Baustoffe sind auf zu erwartenden Chemismus und vorhandener Ungewissheiten ausgewählt und optimiert.

- Bewertung der optimierten Konstruktionsprinzipien und Materialien im Hinblick auf deren Sicherheitsfunktionen (Sicherheitskonzept) in Abhängigkeit von möglichen spezifischen Einwirkungen als Berechnungsparameter für die Langzeitsicherheitsbewertung
- Ableitung der Sicherheitsspezifikationen aus der Langzeitsicherheitsbewertung
Diese konkreten Merkmale dienen der Dokumentation des unbedenklichen und genehmigten Rahmens für den Stilllegungsbetrieb des ERAM

INTRO – WAS KANN MAN MACHEN?



⇒ Was muss alles untersucht werden?

ÜBERSICHT ÜBER BAUSTOFFUNTER- SUCHUNGEN FÜR STILLEGUNGSVERFAHREN

Am Beispiel des Endlagers
für radioaktive Abfälle
Morsleben (ERAM)

01

VORBEMERKUNGEN

02

UNTERSUCHUNGSPROGRAMME

03

ZUSAMMENFASSUNG



A yellow spider crane is positioned in a quarry, with its boom extended upwards. A worker is visible in a basket at the end of the boom. The background shows a large, textured rock face.

VORBEMERKUNGEN

01

VORBEMERKUNGEN BENÖTIGTE BAUSTOFFUNTERSUCHUNGEN

- Komplexes Thema, viele verschiedene Perspektiven
- Untersuchungen sind spezifisch für u. a.
 - Salzfazien
 - Sicherheitskonzept und Stilllegungsmaßnahmen
 - Sicherheitsfunktionen der Komponenten
 - Baustoffe und Bauwerkskonstruktion
 - Features, Events and Processes (FEP)
 - Nachweisführung
 - Sicherheitsanalysen
 - Herstellverfahren und Einbringtechnologie

⇒ **Keine allumfassende Darstellungsmöglichkeit**



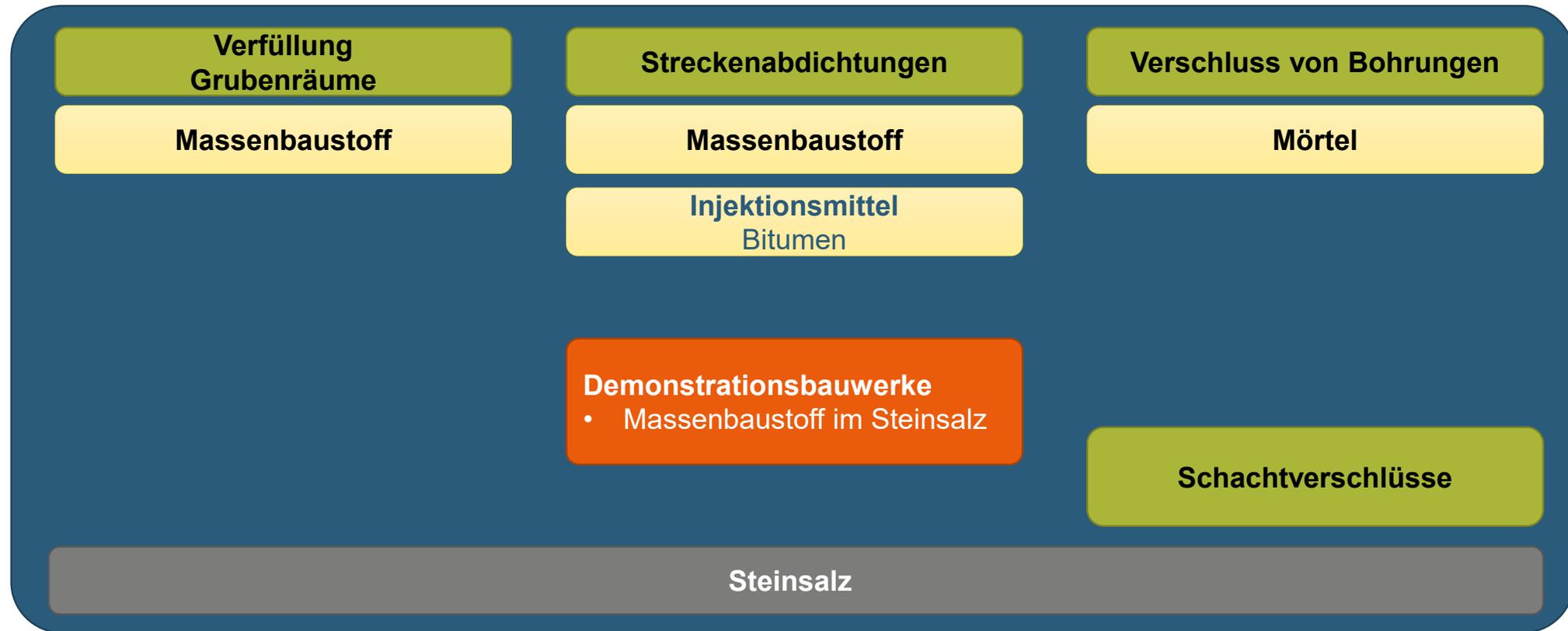
⇒ **Darstellung am Beispiel ERAM**

- Komplex
- ⇒ Abdeckung von Eventualitäten

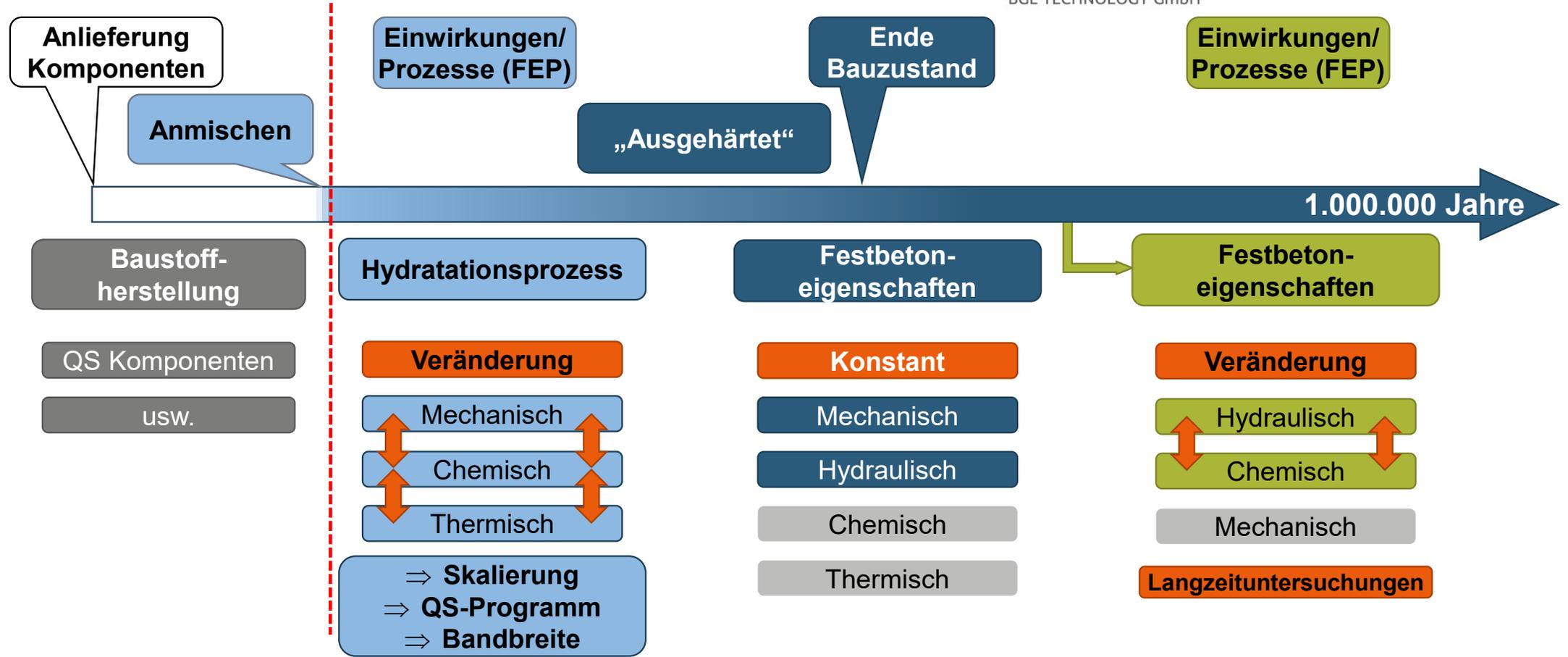
UNTERSUCHUNGS-RELEVANTE KOMPONENTEN IM ERAM



UNTERSUCHUNGS-RELEVANTE KOMPONENTEN IDEALES ENDLAGER



ÜBERBLICK ÜBER DIE UNTERSUCHUNGS-RELEVANTE, ZEITLICHE ENTWICKLUNG



EISBERG DER UNTERSUCHUNGEN



Basis für Stilllegungsverfahren

Voruntersuchungen

- Vorab-Messungen
- Entwicklung Messmethodik
- historische Gründe

Validierung

- Redundante Messungen
- Absicherung von Ergebnissen
- Ausschluss von Fehlinterpretationen
- Systemverständnis
- Bewertung von Ergebnissen

„Resterampe“

Aufbereitung von Bestandsdaten

**Zwischenberichte, Präsentationen
Protokolle, Besprechungen**

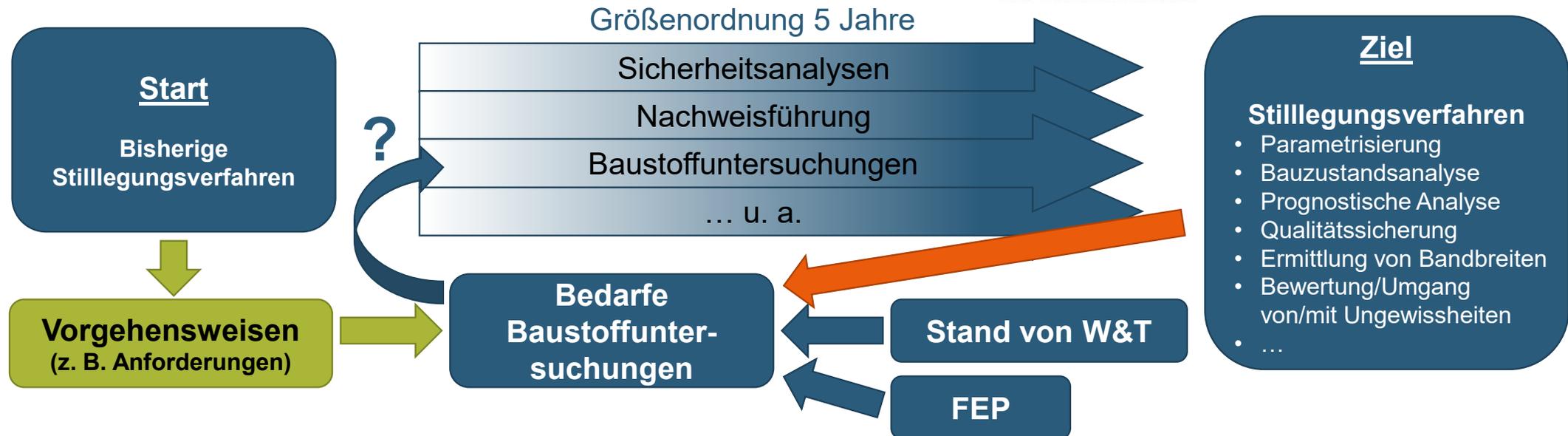
Ergebnisberichte

Verfahrensunterlagen

Genehmigungsunterlagen

Abwägung
Aufwand – Nutzen

VERFAHRENSTECHNISCHE RANDBEDINGUNGEN



Parallelisierung der Arbeiten

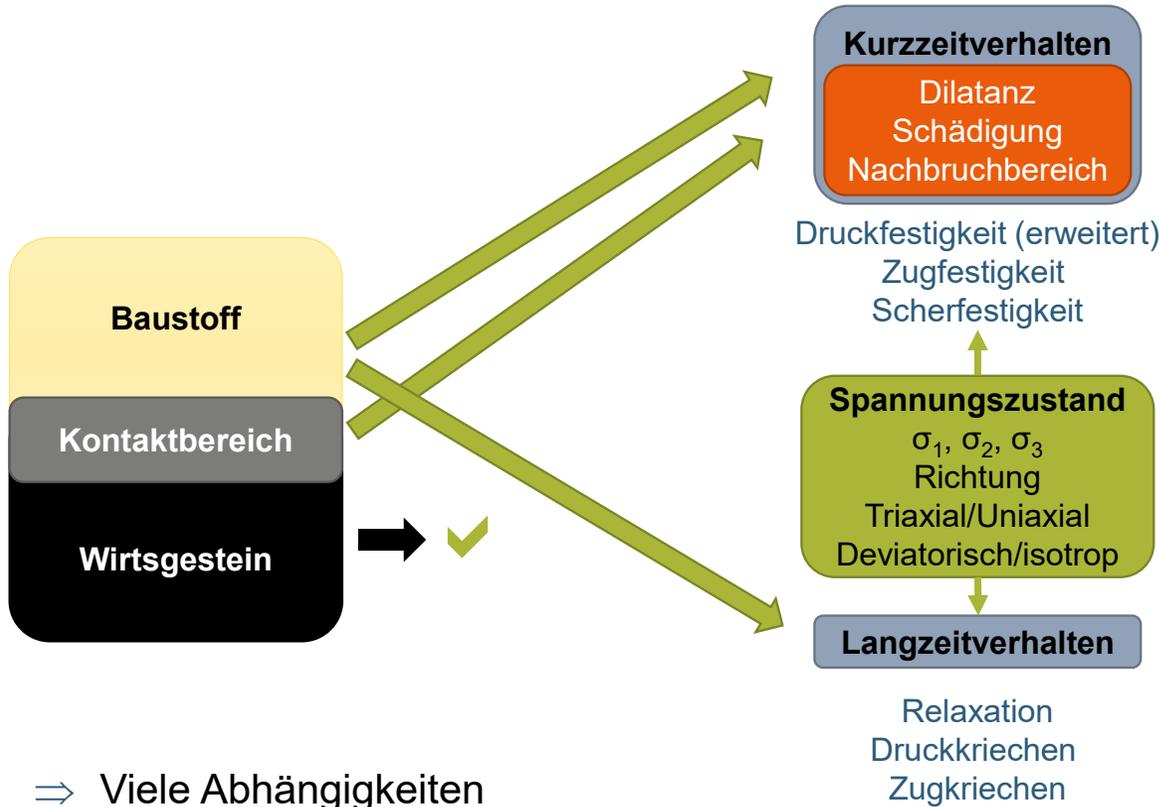
- ⇒ Bedarfe Baustoffuntersuchungen werden im Verfahren konkretisiert
- ⇒ Exakte Festlegung zu Beginn nicht möglich!
- ⇒ Viel Freiheit und hohe Flexibilität bei Untersuchungen notwendig



UNTERSUCHUNGS- PROGRAMME

02

MECHANISCHE UNTERSUCHUNGEN



- ⇒ Viele Abhängigkeiten
- ⇒ Reduzierung der Untersuchungen



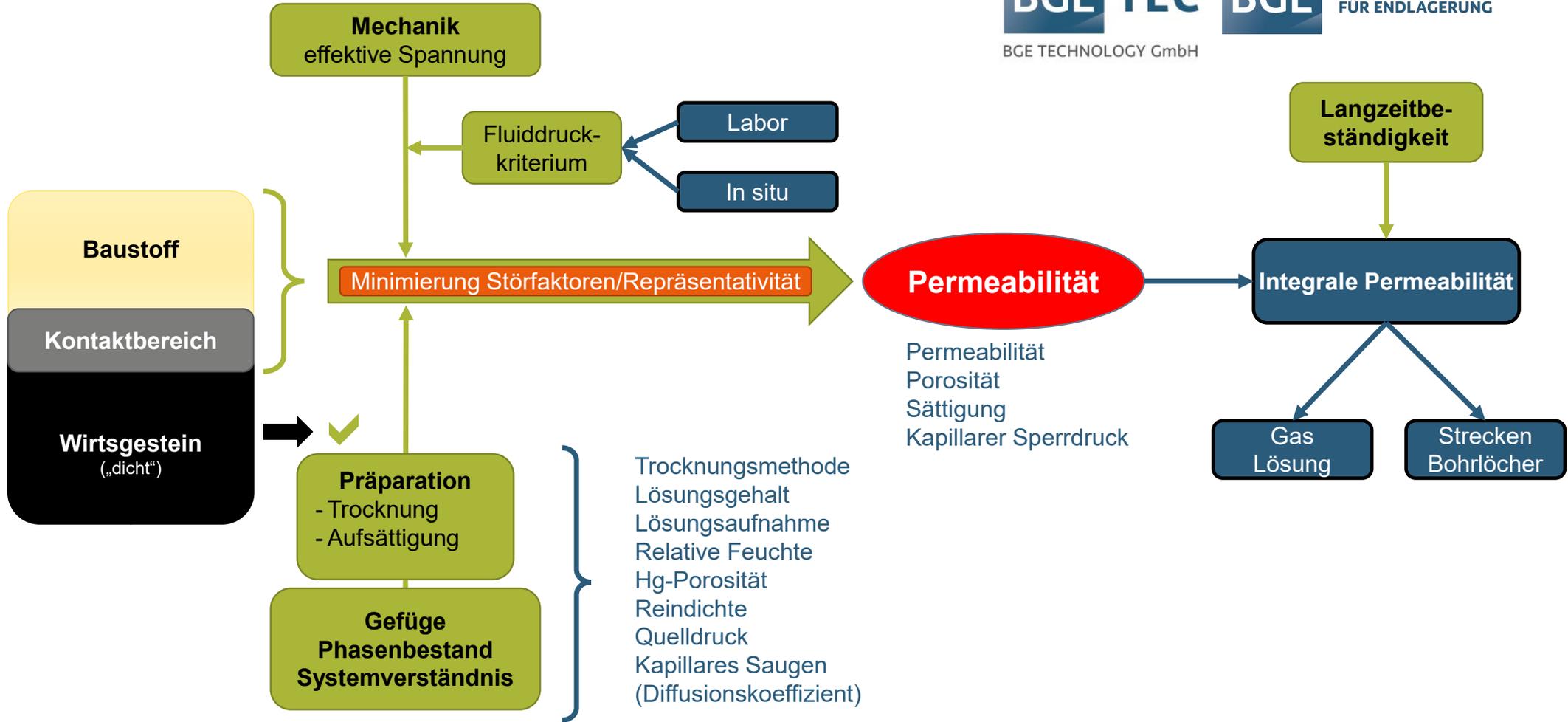
BUNDESGESELLSCHAFT FÜR ENDLAGERUNG

BGE TECHNOLOGY GmbH

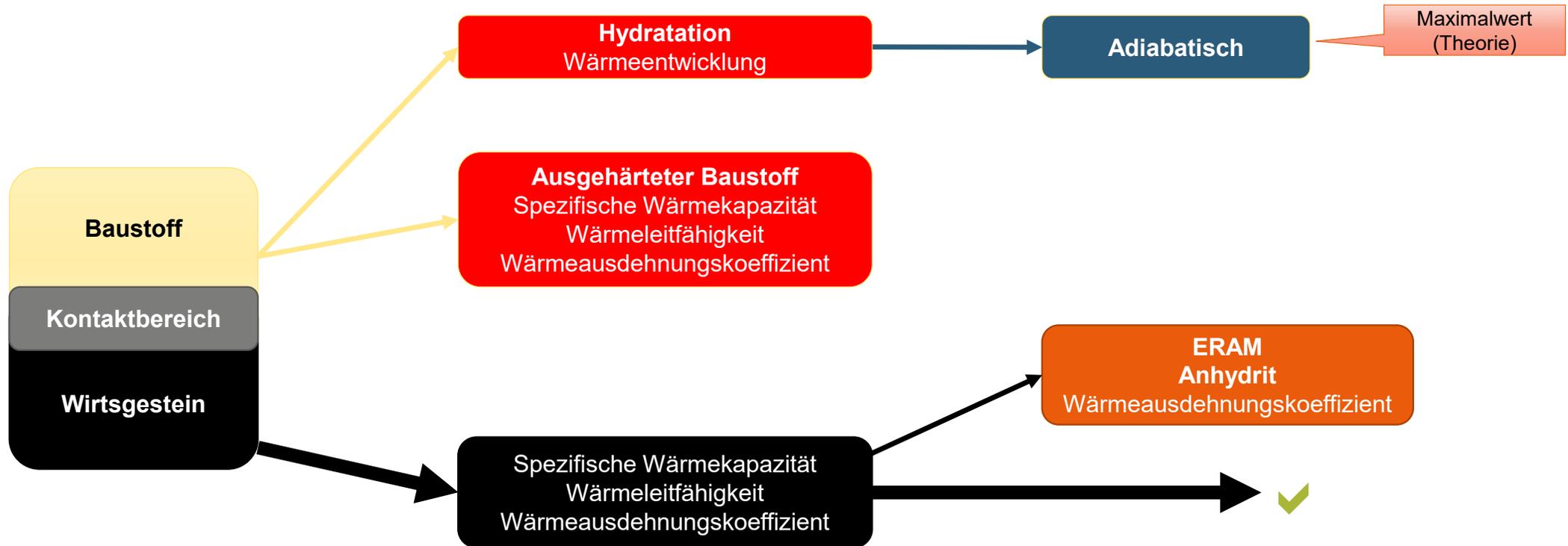
Spannung vs Verformung



HYDRAULISCHE UNTERSUCHUNGEN



THERMISCHE UNTERSUCHUNGEN



UNGEWISSHEITEN UND UMGANG MIT UNGEWISSHEITEN



„Ungewissheit ist ein Zustand unvollständiger Kenntnis über ein Phänomen oder einen Sachverhalt, der sich aus einem auflösbaren oder nicht auflösbaren Mangel an Information, aus Unschärfen oder aus unterschiedlichen Auslegungen zu bereits bekannten Informationen ergeben kann.“

⇒ Müssen betrachtet werden

z. B.:

- Messmethoden, Messgenauigkeit, Interpretationsfehler, Repräsentativität Probe, Streubreiten, Skaleneffekt
- Zusammensetzung Baustoffkomponenten, Bandbreite Material (Baustoff/Gestein)
- Bauausführung (QS)
- Untersuchungen nach Bauzustand und Prognose
- Zukünftige Entwicklungen (Lösungs- und Gasdruckentwicklung)
- Labor vs. in situ Verhältnisse/Baustelle

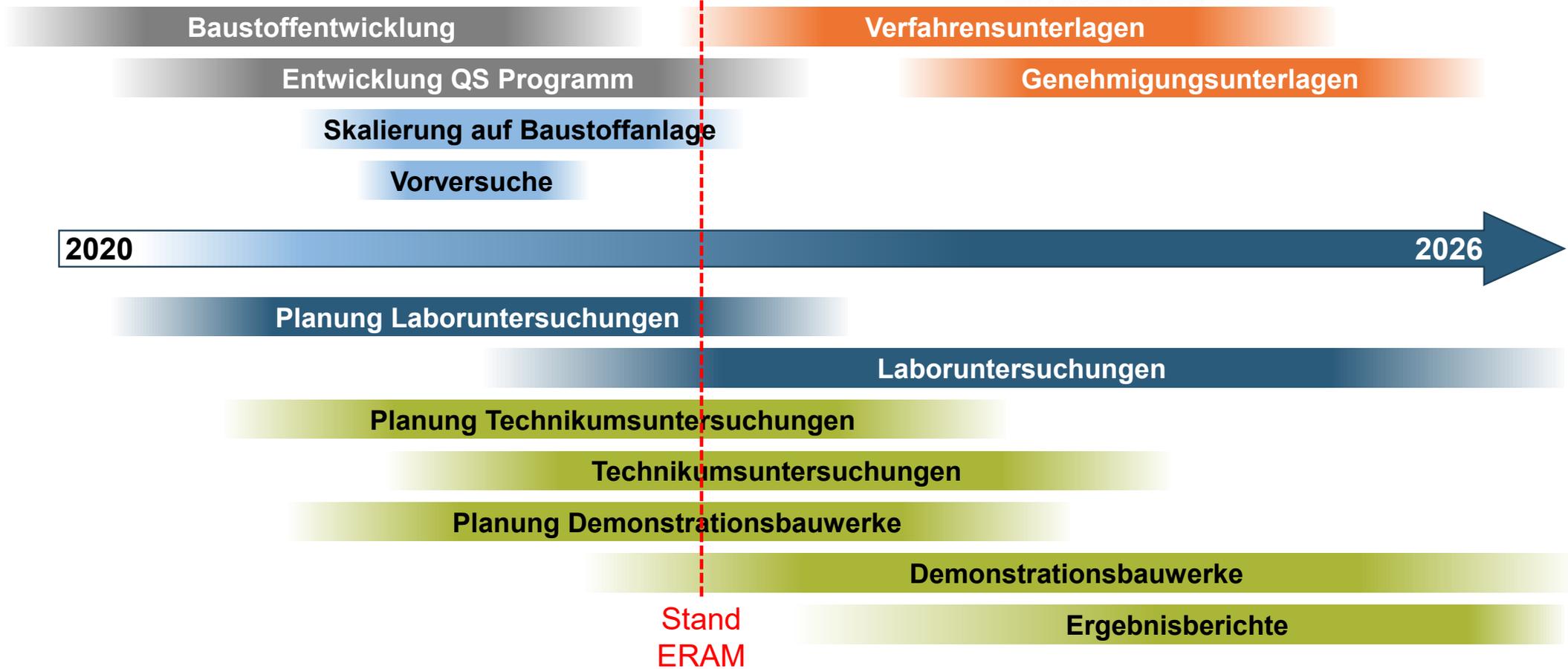
⇒ Auswirkungen auf QS-Programm und Robustheit der Ergebnisse



ZUSAMMENFASSUNG

03

ZUSAMMENFASSUNG ABLAUF UND AKTUELLER STAND ERAM (SCHEMATISCH)





**BUNDESGESELLSCHAFT
FÜR ENDLAGERUNG**



TEC

BGE TECHNOLOGY GmbH

DR. FLORIAN REMPEL
EMO-SL.3/1

Zentrale Peine | Eschenstr. 55 | 31224 Peine
T +49 5171 43-1146
E florian.rempel@bge.de

www.bge.de
www.einblicke.de



@die_BGE

www.bge-technology.de

2.3

H.-J. Engelhardt, R. Wendling, F. Rempel, A. Carstensen, M. Heidmann-Ruhz, L. von Borstel und H. Räuschel: **Qualitätssicherung von Baustoffen**



QUALITÄTSSICHERUNG VON BAUSTOFFEN

Mit Strategie zum Erfolg



BGE TECHNOLOGY GmbH



BUNDESGESELLSCHAFT
FÜR ENDLAGERUNG

URSACHEN UND ZIELE

02

AUFGABEN DER QUALITÄTSSICHERUNG

03

BESONDERHEITEN DES ENDLAGERBERGBAUS
IM SALINAR

04

SCHLUSSFOLGERUNGEN

05

BEISPIELE – BGZ MORSLEBEN,
SCHACHTANLAGE ASSE II

06

ZUSAMMENFASSUNG

URSACHEN UND ZIELE



Baustoffe müssen Anforderungen erfüllen,
damit ein Bauwerk über die geforderte Zeitphase seine Funktion erfüllt.

Ziel der Baustoffentwicklung ist Rezepturen herzuleiten, die diese Anforderungen erfüllen.

Qualität: Maß, in dem ein Objekt (der Baustoff) den Anforderungen entspricht.

Qualitätssicherung: Maßnahmen zur Sicherstellung festgelegter Anforderungen.

URSACHEN UND ZIELE



Abweichungen vom Soll während der gesamten Wertschöpfungskette

- Abweichungen durch Geräteverschleiß, technische oder menschliche Fehler
- Variabilität von Eigenschaften innerhalb der zulässigen Konformitätsbereiche, z.B. Wasseranspruch
- Änderung von Rahmenbedingungen, die relevante Baustoffeigenschaften beeinflussen können
Wechsel des Mixers, Modifikation des Rohrleitungssystems, etc.

URSACHEN UND ZIELE



Ziele der Qualitätssicherung (QS) sind,

- potenziell negative Einflüsse auf die Qualität eines Endproduktes zu erkennen und zu beseitigen. (Identifizierung und Anwendung vorbeugender Maßnahmen)
- alle Tätigkeiten und Abläufe zu prüfen, inwiefern sie den Qualitätszielen entsprechen.
- Maßnahmen zur Sicherstellung der Anforderungen umzusetzen. (dauerhafte Konformität mit den Anforderungen - Qualitätskontrolle)
⇒ Abweichungen schnellstmöglich erkennen und beseitigen.
- Dokumentation des Produktionsprozesses und der Eigenschaften
- Nachweis des anforderungsgerechten Baustoffeinsatzes. Voraussetzung für die Projektabnahme.



AUFGABEN DER QUALITÄTSSICHERUNG

02

AUFGABEN DER QUALITÄTSSICHERUNG



Organisatorische Aufgaben (Qualitätsplanung)

- Erstellen eines Qualitätssicherungsplans.
Was wird wie, wann und von wem durchgeführt und dokumentiert.
- Beschreibung (Dokumentation) und Prüfung der Arbeitsschritte
- Festlegung von Messverfahren und Messzyklen
- Benennung von Prüfern und von Prüfinstitutionen
- Festlegungen zum Transport, Lagerung und Entsorgung von Probematerial
- Schulungsmaßnahmen
- Festlegung von Meldekettten
- Vorgehen bei Nicht-Konformität

Technische Aufgaben (Qualitätskontrolle)

- Überwachung von Tätigkeiten und maschineller Prozesse
- Durchführung von Geräteprüfungen inkl. Kalibrierung, Eichung und Materialprüfungen
- Prüfung/Auswertung der Ergebnisse

AUFGABEN DER QUALITÄTSSICHERUNG



Vorlaufende Arbeiten:

- Lieferantenbewertung bezüglich Lieferqualität, Liefer-/Termintreue, Anwendung eines Qualitätsmanagement-Systems, wie DIN EN ISO 9001
Eigen-/Fremdüberwachung
- Erstbemusterung von Probematerial
- Durchführung von Baustoffuntersuchungen im Technikum und in-situ
- Festlegung von Prüfinstitutionen, Abstimmung von Prüfverfahren und Prüfkriterien

Baustoffproduktion (Qualitätsprüfung/-kontrolle)

- Wareneingangsprüfungen
- Baustoffprüfungen
- Kontrolle der Lieferanten und Prüfinstitutionen
- Endkontrolle nach dem Vorliegen aller Daten, inkl. statische Auswertung



BESONDERHEITEN DES ENDLAGERBERGBAUS IM SALINAR

03

BESONDERHEITEN DES ENDLAGERBERGBAUS IM SALINAR



- Verwendung unüblicher Ausgangsstoffe, wie Magnesiumoxid, Salze, NaCl-/MgCl₂-Lösung
⇒ Spezialbaustoffe
- Korrosive Wirkung der Salze und Baustoffe
→ Probekörperpräparation, Einfluss auf Prüf-/Messmittel
- Rohrleitungsgebundener Transport von Ausgangsstoffen (Falleitungen, pneumatischer Transport) und von Baustoffen
- Eingeschränkter Zugang der „Baustelle“
- Eingeschränkte Möglichkeit der Bauwerksprüfung
- Unübliche oder außergewöhnliche Anforderungen



**BEWÄHRTE VORGEHENSWEISEN DER QUALITÄTSSICHERUNG
MÜSSEN ANGEPASST WERDEN**

BESONDERHEITEN DES ENDLAGERBERGBAUS IM SALINAR



Unübliche Anforderungen an Materialeigenschaften, z.B.

- Drainagelösung
 - Volumenexpansion beim Erhärten
 - Kompaktionsverhalten, Kriechen
 - Permeabilität in Bezug auf Salzlösungen
- ⇒ Neuentwicklung von Prüfverfahren und Herleitung von Prüfkriterien unter Berücksichtigung relevanter Einflussgrößen
- ⇒ Simulation von Einflussgrößen, wie Schergrad, Temperatur, Druck
- ⇒ Entwicklung von Tools zur Datendokumentation und -auswertung

BESONDERHEITEN DES ENDLAGERBERGBAUS IM SALINAR



Durchführung unüblicher (vom Normwesen abweichender) Prüfungen Wechselndes Betriebspersonal

- Einsatz möglichst einfacher, automatisierter Prüfungen
- Erstellung detaillierter Arbeits-/Prüfanweisungen
- Umfangreiche Schulungsmaßnahmen
- Einfache Datendokumentation

⇒ Auswahl von Prüfinstitutionen mit hinreichenden Kenntnissen zu den Spezialbaustoffen

⇒ Hoher Abstimmungsbedarf mit Lieferanten und externen Prüfinstitutionen

BESONDERHEITEN DES ENDLAGERBERGBAUS IM SALINAR



Rohrleitungsgebundener Baustofftransport

- Eingeschränkte Möglichkeit der Probenahme (Arbeitssicherheit)

Bergbaubedingungen

- Eingeschränkte Möglichkeit des Zugangs für Baustoffprüfer und Techniker
- Beschränkungen beim Transport von Probematerial/Probekörpern

⇒ Durchführung der Probenahme und von Baustoffuntersuchungen über Tage!

A photograph of a yellow spider crane in a tunnel. The crane has four legs and a long boom. A worker is in a basket at the end of the boom, positioned near the top of the tunnel. The tunnel walls are rough and grey. The scene is dimly lit, with some lights visible on the crane and in the background.

SCHLUSSFOLGERUNGEN

04

SCHLUSSFOLGERUNGEN



Prüfresultate von Festmaterialeigenschaften liegen erst nach dem Baustoffeinbau vor.

- ⇒ Vorbeugende QS!
- ⇒ Hohe Priorität der Prüfung von Ausgangsstoffen (vom Lieferanten/bei Anlieferung), von Lieferpapieren, der Baustoffherstellung (Dosier- und Mischprotokolle) und von Frischmaterialeigenschaften (Dichte, Luftporengehalt, Fließeigenschaften).
- ⇒ Visuelle Prüfungen / Schüttverhalten
- ⇒ Ggf. auch chemisch-mineralogische Untersuchungen, z.B. bei Lösungen
- ⇒ Einsatz von „Schnellprüfverfahren“ vor dem Baustoffeinbau
- ⇒ Detaillierte Vorgaben zum Transport und der Lagerung von Ausgangsstoffen
- ⇒ Schnelle Datenweitergabe – Meldekettten. Schnelles Beseitigen von Störungen



BEISPIELE

05

QUALITÄTSSICHERUNG BERGBAULICHE GEFAHRENABWEHRMAßNAHME ZENTRALTEIL



Mischanlage
QS-Maßnahmen



QS-Maßnahmen

Anforderung an die einaxiale Druckfestigkeit, Zugfestigkeit und den Elastizitätsmodul

Herleitung eines maximalen Wassergehaltes, einer Mindestdichte
und eines maximalen Setzfließmaßes als Prüfkriterien

Prüfung der Rezeptur und damit des Wassergehaltes nach den Angaben des Dosierprotokolls der Mischanlage
Bestimmung des Wassergehaltes durch Darren
Bestimmung der Temperatur, des Setzfließmaßes, der Dichte und des Luftporengehalts bei Anlieferung
Berechnung der Dichte ohne Luftporen und Vergleich mit den Rechenwerten

QUALITÄTSSICHERUNG AM BEISPIEL DER SCHACHTANLAGE ASSE II



Bau von Strömungsbarrieren mit Sorelbeton A1 - Was wird geprüft?

Eingangskontrolle **Magnesiumoxid (MgO) (Bindemittel)**

- Prüfzeugnis des Lieferanten / Lieferpapiere
- Visuelle Prüfung
- Zitronensäurereaktivität

→ Freigabe zum Entladen

automatische Entnahme einer MgO-Mischprobe aus dem Förderstrom in die Silos

Nachfolgende Laboruntersuchungen

- Chemisch-mineralogische Zusammensetzung
- Wassergehalt / Feuchte
- Korngrößenverteilung
- Korndichte
- Zitronensäurereaktivität

Wending, R. (2017) QS-Programm zur Sicherstellung der Baustoffeigenschaften von Sorelbeton A1 für Strömungsbarrieren, Freiberg, den 4. Mai 2017.

QUALITÄTSSICHERUNG AM BEISPIEL DER SCHACHTANLAGE ASSE II



Bau von Strömungsbarrieren mit Sorelbeton A1 - Was wird geprüft?

Eingangskontrolle **Salz (Gesteinskörnung, Zuschlag)**

- Prüfzeugnis des Lieferanten / Lieferpapiere
 - Visuelle Prüfung
- Beprobung bei der Förderung nach unter Tage

Nachfolgende Laboruntersuchungen

- Chemisch-mineralogische Zusammensetzung
- Wassergehalt / Feuchte
- Korngrößenverteilung
- Korndichte

Wendling, R. (2017) QS-Programm zur Sicherstellung der Baustoffeigenschaften von Sorelbeton A1 für Strömungsbarrieren, Freiberg, den 4. Mai 2017.

QUALITÄTSSICHERUNG AM BEISPIEL DER SCHACHTANLAGE ASSE II



Bau von Strömungsbarrieren mit Sorelbeton A1 - Was wird geprüft?

Eingangskontrolle **Magnesiumchlorid-Lösung (Anmischlösung)**

- Prüfzeugnis des Lieferanten / Lieferpapiere
- Visuelle Prüfung
- Temperatur und Lösungsdichte
- Chemisch-mineralogische Zusammensetzung und Berechnung der Salzgehalte

→ Freigabe zum Entladen
und Förderung in das Speicherbecken unter Tage

Wendling, R. (2017) QS-Programm zur Sicherstellung der Baustoffeigenschaften von Sorelbeton A1 für Strömungsbarrieren, Freiberg, den 4. Mai 2017.

QUALITÄTSSICHERUNG AM BEISPIEL DER SCHACHTANLAGE ASSE II



Bau von Strömungsbarrieren mit Sorelbeton A1 - Was wird geprüft?

Für die Baumaßnahmen sind relevant:

Suspensionseigenschaften

Dichte, Temperatur, Luftporenanteil, Fließverhalten: Fließrinnenmaß

Temperaturentwicklung beim Erhärten – quasiadiabatisches Prüfverfahren

Volumenexpansion beim Erhärten

Festmaterialeigenschaften (externe Prüflabore)

Gas- und Lösungspemeabilität, Gaseindringdruck – Verfahrensentwicklung
zusammen mit Fa. IBeWa

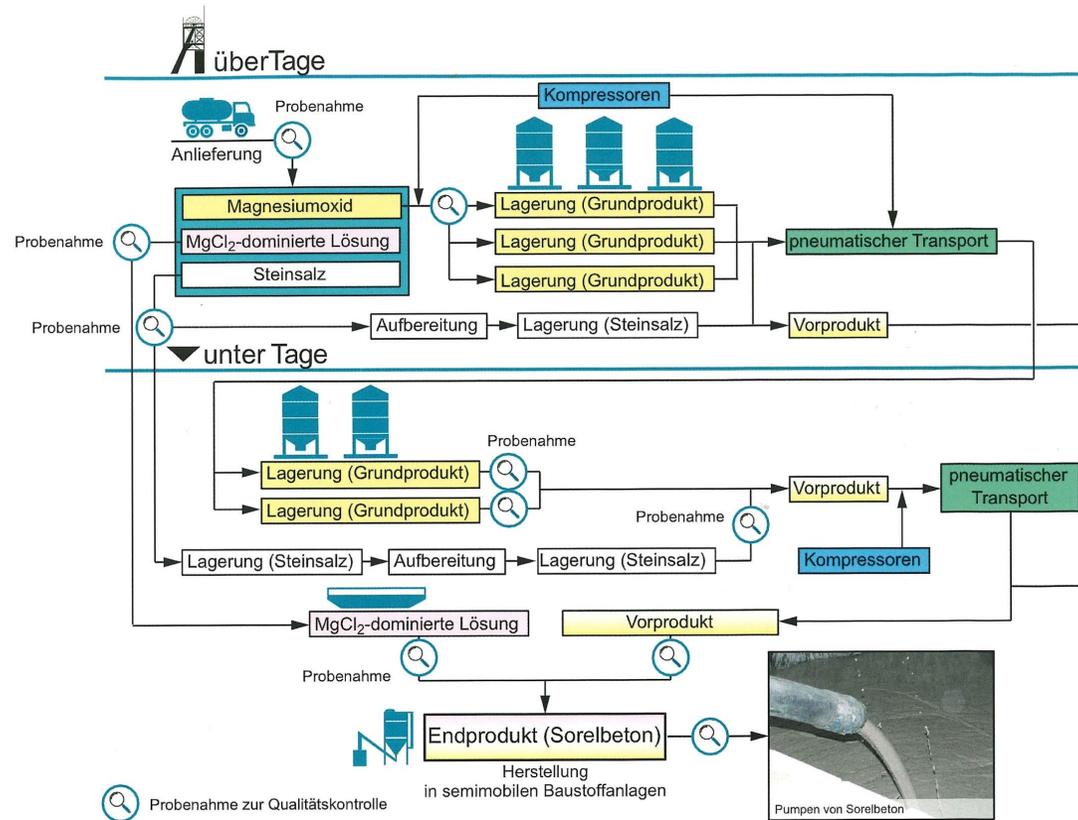
Ersatzkompaktionsmodul – Institut für Gebirgsmechanik GmbH

Einaxiale Druckfestigkeit

Zugfestigkeiten Baustoff und Kontaktflächen

Wending, R. (2017) QS-Programm zur Sicherstellung der Baustoffeigenschaften von Sorelbeton A1 für Strömungsbarrieren, Freiberg, den 4. Mai 2017.

SCHACHTANLAGE ASSE II

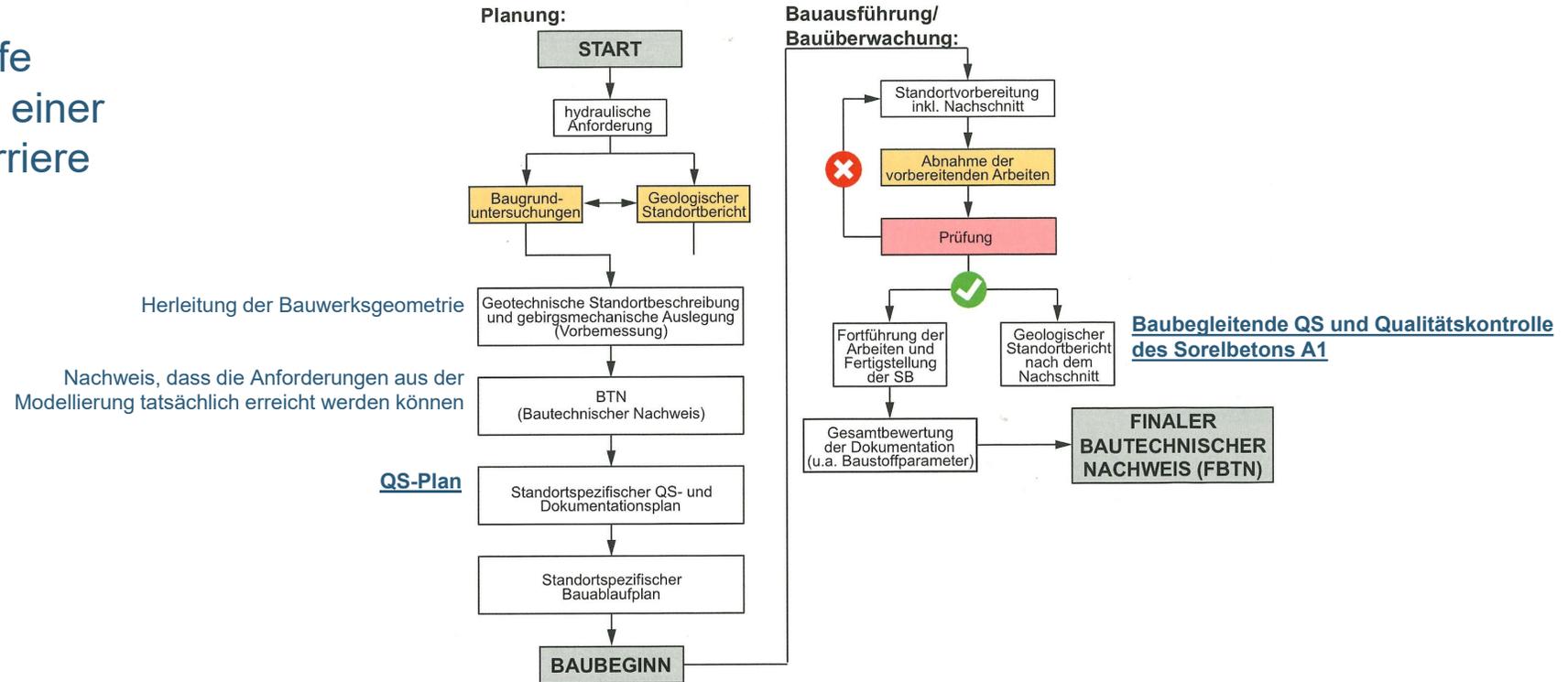


Produktion und Materiallogistik zur Herstellung von Sorelbeton A1 inkl. Probenahmepunkte

Köhler, J.; Teichmann, L.; Heydorn, M. & Wolff, P.E. (2019) Einsatz von Sorelbeton für Verschlussbauwerke und Stabilisierungsmaßnahmen in der Schachtanlage Asse II. Mining Report Glückauf, 155 (5): 485-496.

SCHACHTANLAGE ASSE II

Prozessabläufe zur Erstellung einer Strömungsbarriere



Köhler, J.; Teichmann, L.; Heydorn, M. & Wolff, P.E. (2019) Einsatz von Sorelbeton für Verschlussbauwerke und Stabilisierungsmaßnahmen in der Schachtanlage Asse II. Mining Report Glückauf, 155 (5): 485-496.



ZUSAMMENFASSUNG

05

ZUSAMMENFASSUNG



- Die Anwendung von Qualitätsmanagement- und Qualitätssicherungsprogrammen ist im Baustoffbereich seit langem bewährte Praxis.
- Besondere Bedingungen im Endlagerbergbau, die eine Anpassung erfordern.
 - ⇒ Umfangreiche Anpassung bewährter Vorgehensweisen.
 - ⇒ Vorbeugende und vorlaufende Qualitätssicherung (vor dem Einbau)!
 - ⇒ Herleitung spezieller Verfahren und Prüfkriterien.
- Zur Qualitätssicherung von Baustoffen im Salinar liegen umfangreiche Kenntnisse vor.
- Der Grundstein für eine qualitätsgesicherte Produktion von Baustoffen im Rahmen von Stilllegungsmaßnahmen ist gelegt.

Vielen Dank für Ihre Teilnahme am Meeting

Das Gespräch fortsetzen

Your Continuous Meeting Chat is waiting for you!
Continue chatting after the meeting in Team Chat.

[Zoom öffnen](#)

[Zoom herunterladen](#)

[Audio-Abo](#) | [Zoom-Blog](#) | [Fallstudien von Kunden](#)

2.4

F. Häusler und D. Freyer: Löslichkeitsverhalten von C-S-H-Phasen in NaCl-gesättigten Lösungen vs. THEREDA (Stand Cemdata18)

TUBAF
Die Kesselerweiterung
Seit 1783

Bergakademie Freiberg
TU Bergakademie Freiberg

**Löslichkeitsverhalten von C-S-H-Phasen in NaCl-gesättigten
Lösungen vs. THEREDA (Stand Cemdata18)**

Felix Häusler und Daniela Freyer
TU Bergakademie Freiberg, Institut für Anorganische Chemie, AG Salz- und Mineralchemie

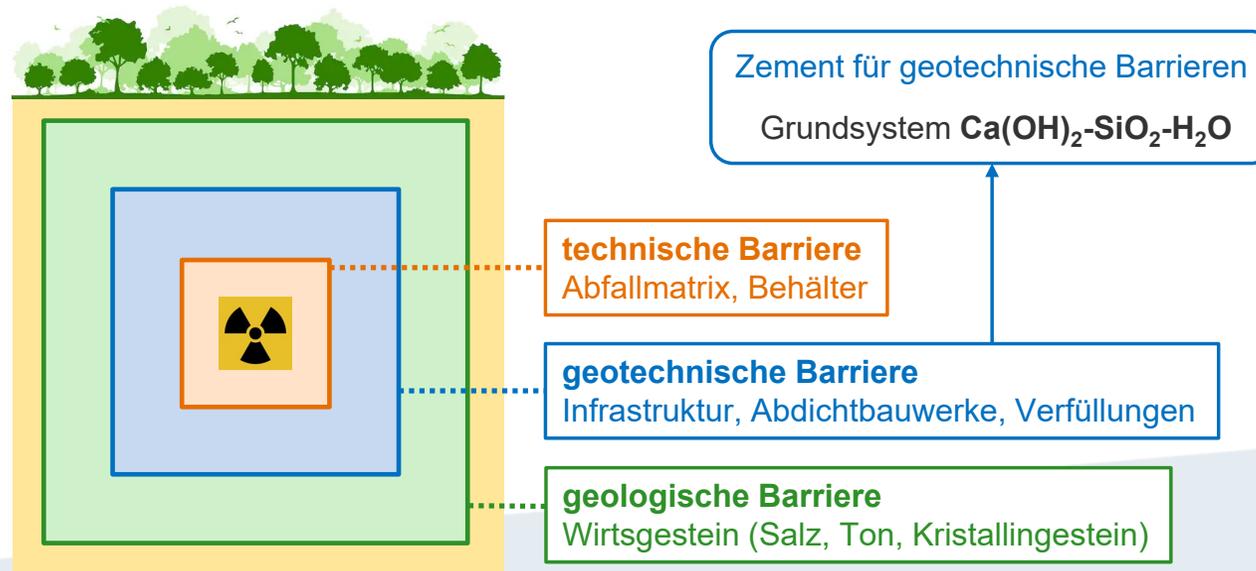
AKB-Workshop, 06. September 2023, Braunschweig

#tubaf

324

Zement in Endlagerkonzepten radioaktiver Abfälle

- Suche geeigneter Wirtsgesteinsformationen [1] [2]
- Umsetzung in Multibarrierensystem
- Zementieren von Abfällen und Zement als geotechnische Barriere
- Wechselwirkung mit Wirtsgestein: Anpassung der Rezeptur



2

Felix Häusler und Daniela Freyer

Löslichkeit von C-S-H-Phasen in NaCl-gesättigten Lösungen

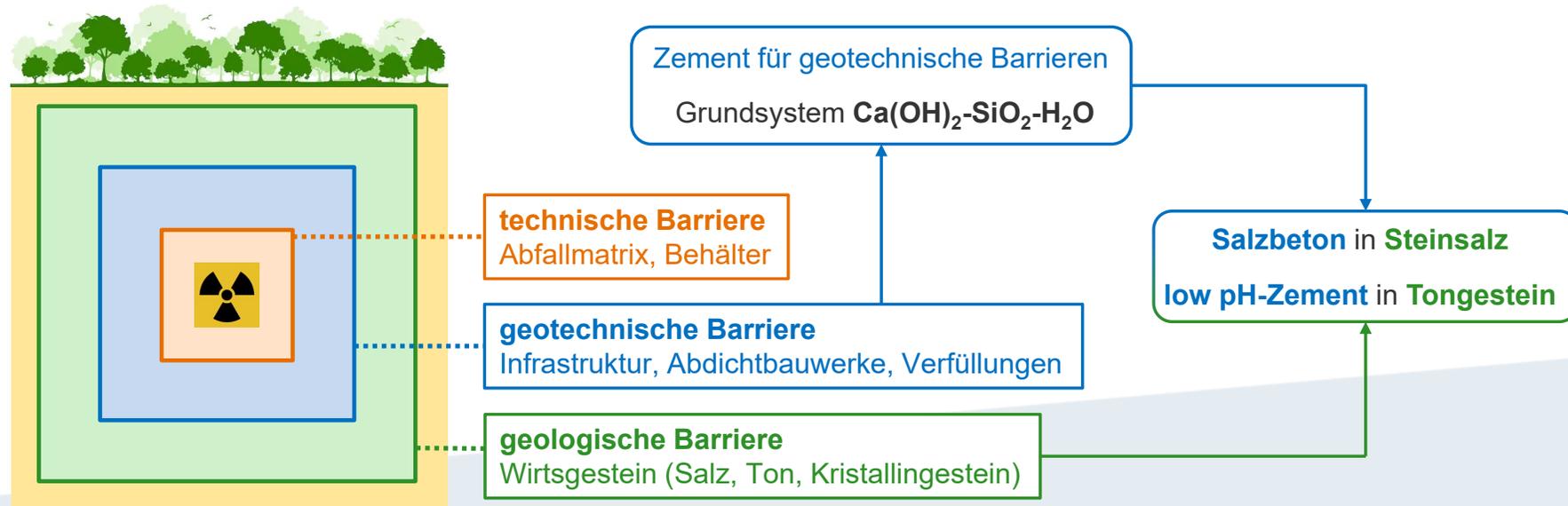
[1] Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle, 2017
https://www.gesetze-im-internet.de/standag_2017/BJNR107410017.html.

[2] Tagesschau, Bericht „Endlagersuche könnte bis mindestens 2046 dauern“, 12. November 2022,
<https://www.tagesschau.de/inland/innenpolitik/suche-nach-atommuell-endlager-103.html>.



Zement in Endlagerkonzepten radioaktiver Abfälle

- Suche geeigneter Wirtsgesteinsformationen [1] [2]
- Umsetzung in Multibarrierensystem
- Zementieren von Abfällen und Zement als geotechnische Barriere
- Wechselwirkung mit Wirtsgestein: Anpassung der Rezeptur



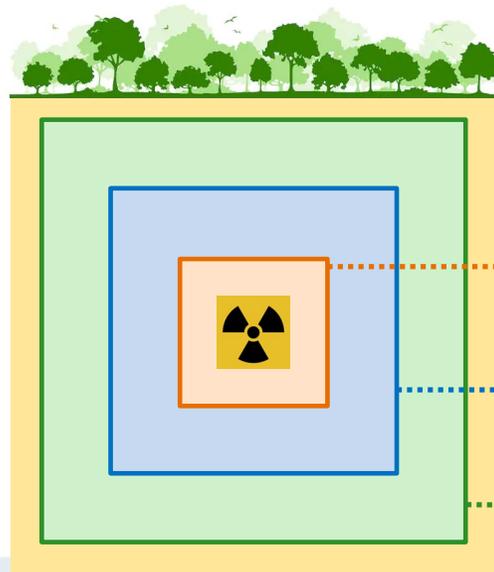
3 Felix Häusler und Daniela Freyer
Löslichkeit von C-S-H-Phasen in NaCl-gesättigten Lösungen

[1] Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle, 2017
https://www.gesetze-im-internet.de/standag_2017/BJNR107410017.html.
[2] Tagesschau, Bericht „Endlagersuche könnte bis mindestens 2046 dauern“, 12. November 2022,
<https://www.tagesschau.de/inland/innenpolitik/suche-nach-atommuell-endlager-103.html>.



Zement in Endlagerkonzepten radioaktiver Abfälle

- Suche geeigneter Wirtsgesteinsformationen [1] [2]
- Umsetzung in Multibarrierensystem
- Zementieren von Abfällen und Zement als geotechnische Barriere
- Wechselwirkung mit Wirtsgestein: Anpassung der Rezeptur



technische Barriere
Abfallmatrix, Behälter

geotechnische Barriere
Infrastruktur, Abdichtbauwerke, Verfüllungen

geologische Barriere
Wirtsgestein (Salz, Ton, Kristallingestein)

Zement für geotechnische Barrieren
Grundsystem $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$

Zement in konzentrierten Salzlösungen

- Einfluss auf Phasenbildung und -umwandlung
- C-S-H-Löslichkeit in gesättigter NaCl-Lösung
- Verhalten abgebundener C-S-H-Zement-/Salzbeton-Probekörper in NaCl/MgCl₂-Lösung

Salzbeton in Steinsalz
low pH-Zement in Tongestein

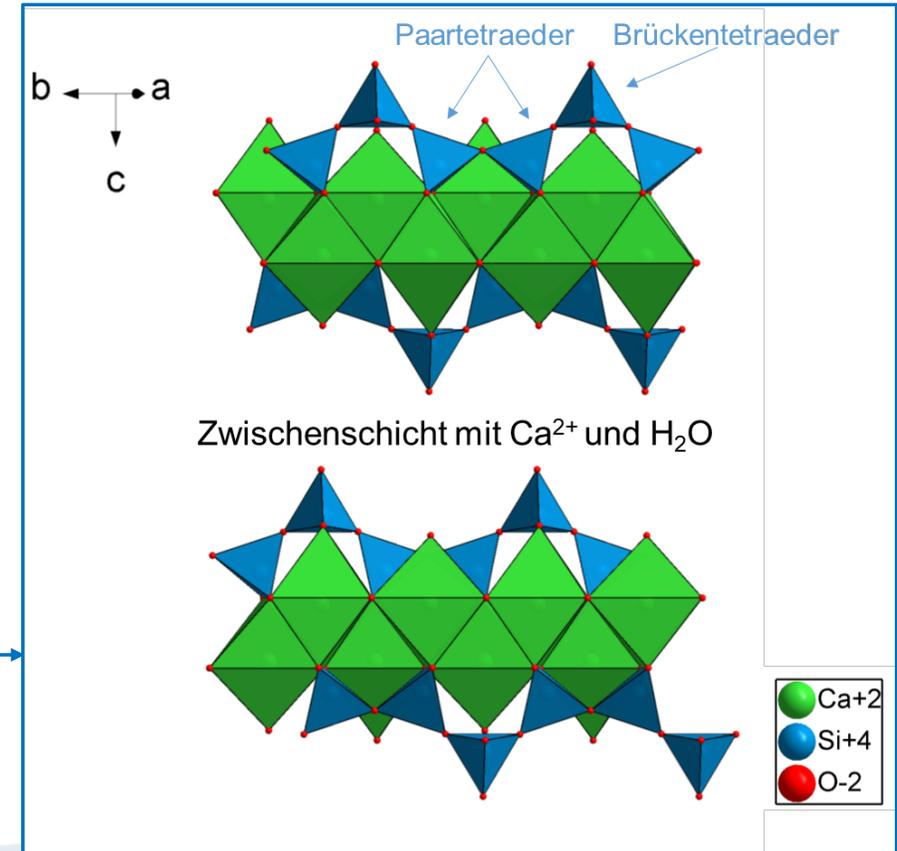
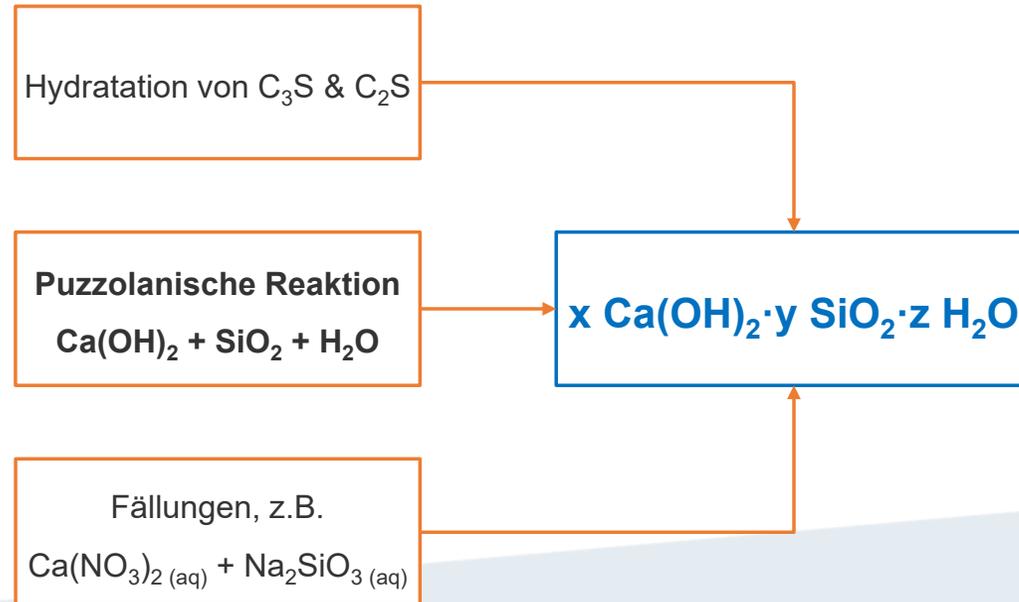
4 Felix Häusler und Daniela Freyer
Löslichkeit von C-S-H-Phasen in NaCl-gesättigten Lösungen

[1] Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle, 2017
https://www.gesetze-im-internet.de/standag_2017/BJNR107410017.html.
[2] Tagesschau, Bericht „Endlagersuche könnte bis mindestens 2046 dauern“, 12. November 2022,
<https://www.tagesschau.de/inland/innenpolitik/suche-nach-atommuell-endlager-103.html>.



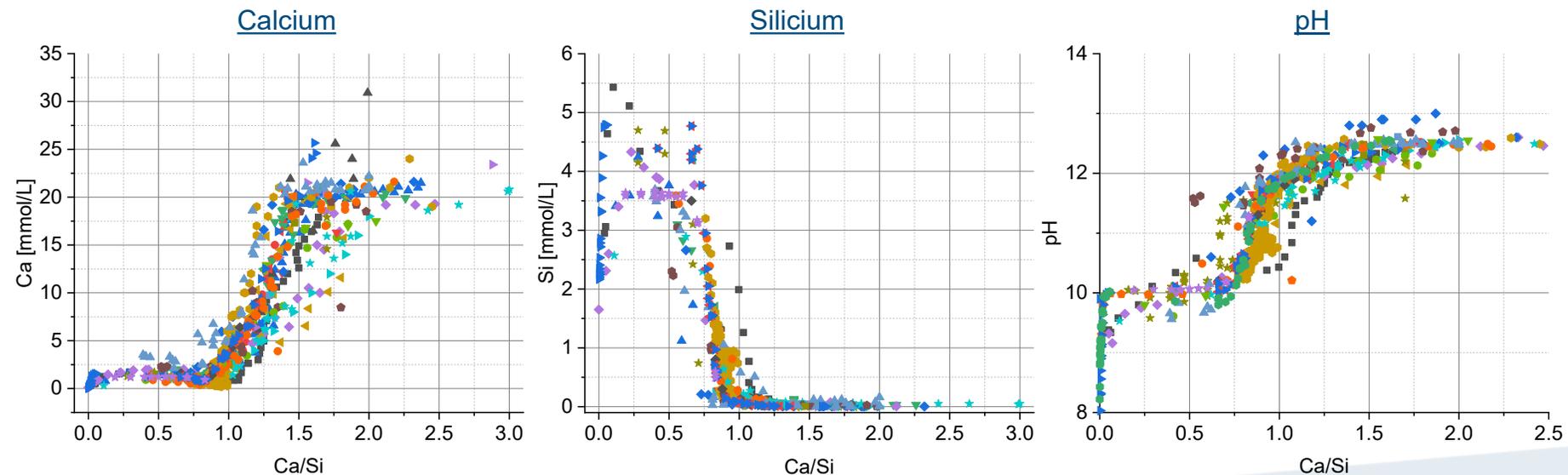
C-S-H-Phasen (Calciumsilicathydrate)

- „C-S-H“ aus Zementnotation (C = CaO, S = SiO₂, H = H₂O,...)
- variable Stöchiometrie, **Ca/Si-Verhältnis**
- häufig als amorph beschrieben, passender: „semikristallin“



Löslichkeit von C-S-H-Phasen in Wasser

- zahlreiche Daten bei Raumtemperatur ^{[1] [2]}, klare Trends in Abh. von Ca/Si
- Cemdata18 ^[3]: 6 C-S-H-Mischphasenmodelle, die Streuung im Löslichkeitsverhalten bei 25 °C abbilden



- Kristallisationsbedingungen teils unklar (Zeit, Temperatur)
- **NaCl-haltige Lösungen: wenige Daten bis 1.5 M NaCl**

6

[Felix Häusler](#) und Daniela Freyer

Löslichkeit von C-S-H-Phasen in NaCl-gesättigten Lösungen

[1] C. S. Walker et al., Cem. Con. Res., 79, 1-30, 2016.

[2] J. Haas, A. Nonat, Cem. Con. Res., 68, 124-138, 2015.

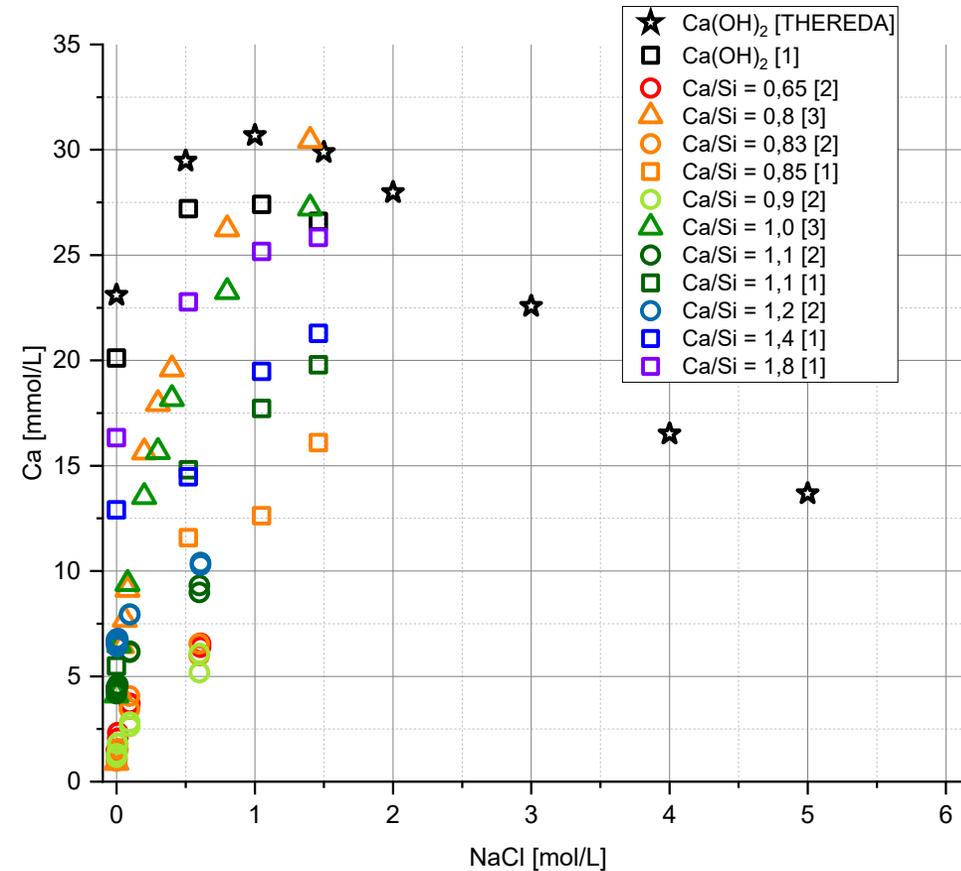
[3] B. Lothenbach et al., Cem. Con. Res., 115, 472-506, 2019.



Löslichkeit von C-S-H-Phasen in wässrigen NaCl-Lösungen

Literatur:

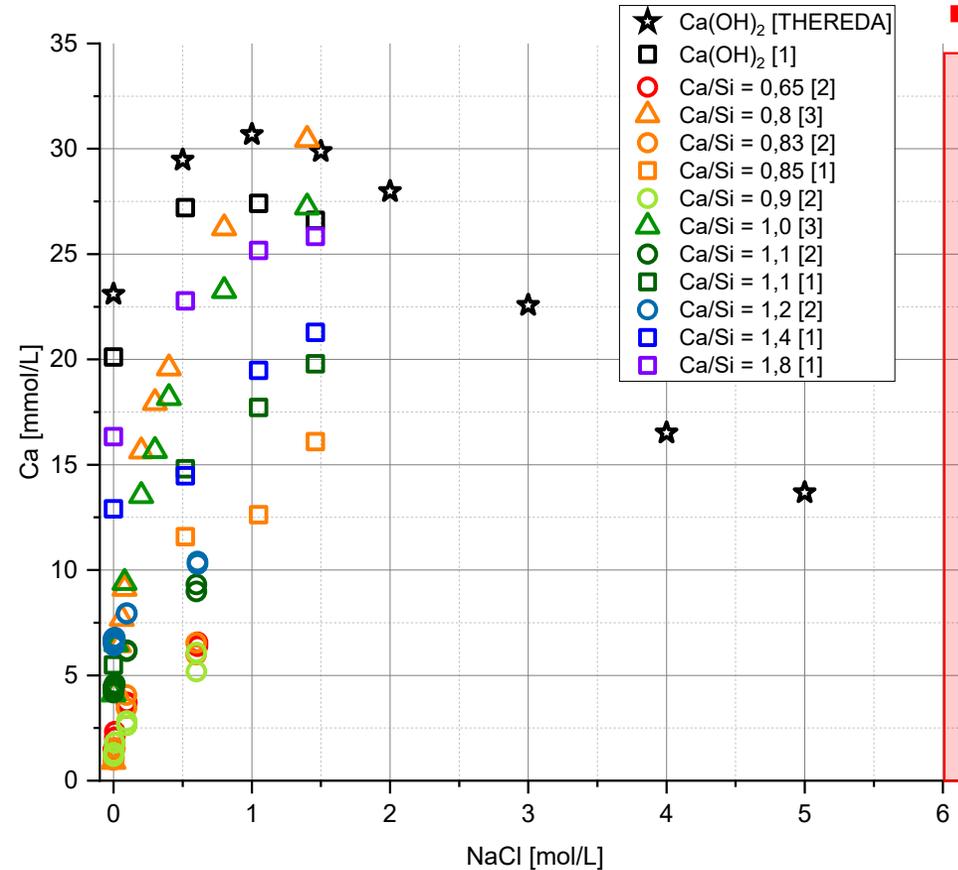
- wenige Daten bis **1.5 M NaCl** [1-4]
 - Anstieg Ca^{2+} -Konzentration mit NaCl-Konzentration
 - ähnlich $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -Löslichkeitsverhalten
 - Streuung der Literaturdaten
 - Ca/Si-Abhängigkeit
 - Absolutwerte bei gleichem Ca/Si
 - Steinsalz: gesättigte NaCl-Lösung (**6.1-6.2 M NaCl**)
 - keine Literaturdaten
 - Modellrechnungen mit existierenden C-S-H-Mischphasenmodellen sind möglich
- Validierung durch exp. Daten steht aus



Löslichkeit von C-S-H-Phasen in wässrigen NaCl-Lösungen

Literatur:

- wenige Daten bis **1.5 M NaCl** [1-4]
 - Anstieg Ca^{2+} -Konzentration mit NaCl-Konzentration
 - ähnlich $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -Löslichkeitsverhalten
 - Streuung der Literaturdaten
 - Ca/Si-Abhängigkeit
 - Absolutwerte bei gleichem Ca/Si
 - Steinsalz: gesättigte NaCl-Lösung (**6.1-6.2 M NaCl**)
 - keine Literaturdaten
 - Modellrechnungen mit existierenden C-S-H-Mischphasenmodellen sind möglich
- Validierung durch exp. Daten steht aus



Löslichkeit von C-S-H-Phasen in gesättigter NaCl-Lösung

Untersuchungen zum Einfluss von NaCl-Sättigung auf C-S-H

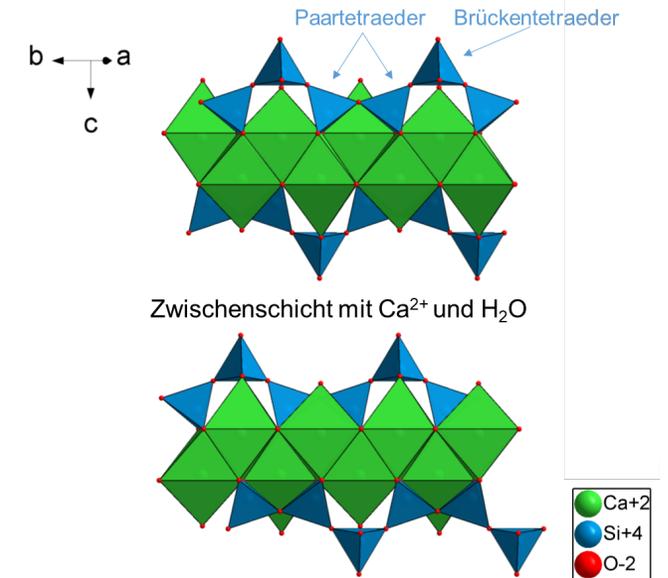
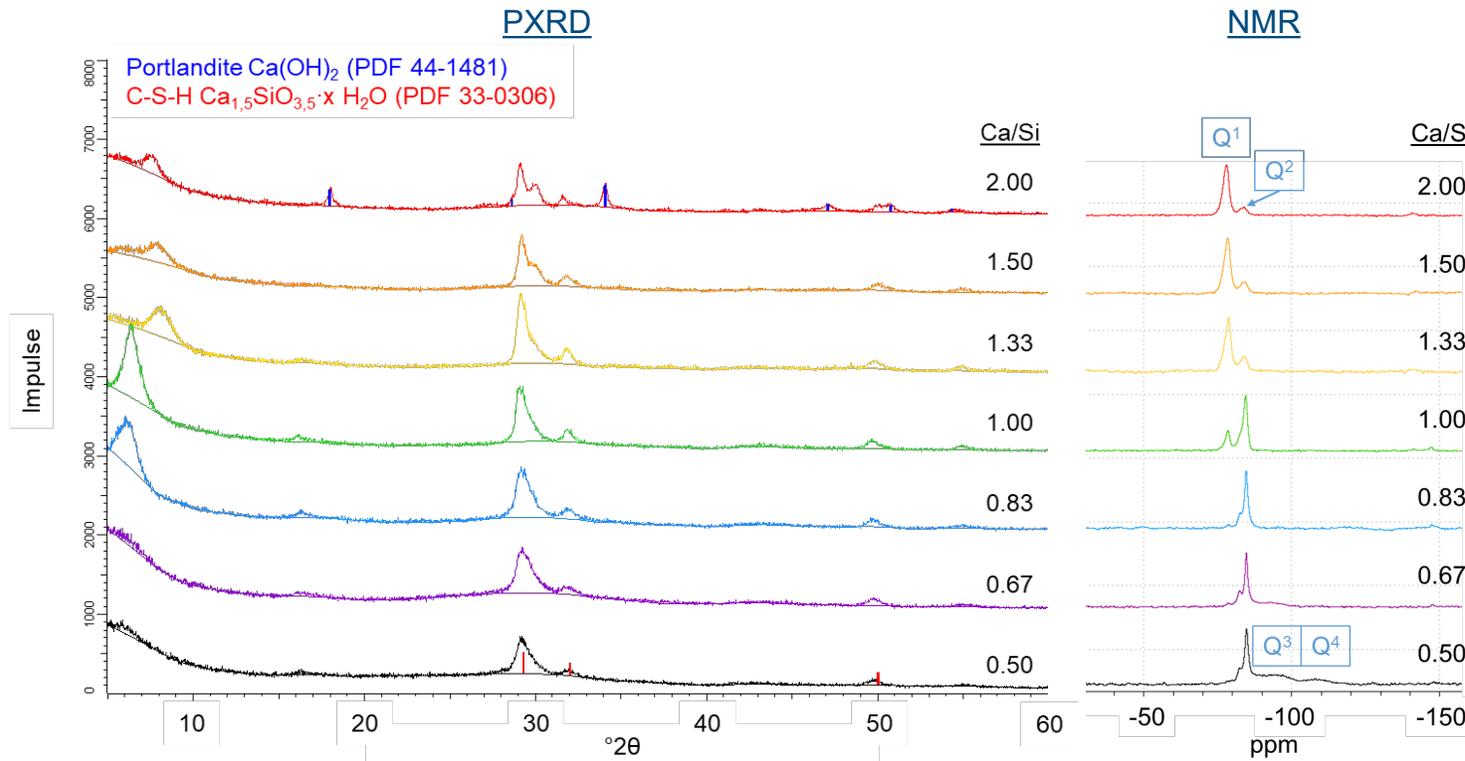
- Versuchsplan:
 - $\text{Ca}(\text{OH})_2$ + amorphes SiO_2 in H_2O bzw. gesättigter NaCl-Lösung, Wasser/Feststoff = 20
 - 25 °C, regelmäßiges Schütteln, Probennahme nach 3, 6 und 14 Monaten
- Lösungsanalytik:
 - Silicium: UV/Vis-Spektroskopie (Silicomolybdänsäure)
 - Calcium: komplexometrische Titration (EDTA)
 - Basizität: potentiometrische Säure-Base-Titration
 - NaCl-freie Proben: ICP-OES
- Festphasenanalytik:
 - PXRD, ^{29}Si -MAS-NMR, REM-EDX



Si-Konzentration

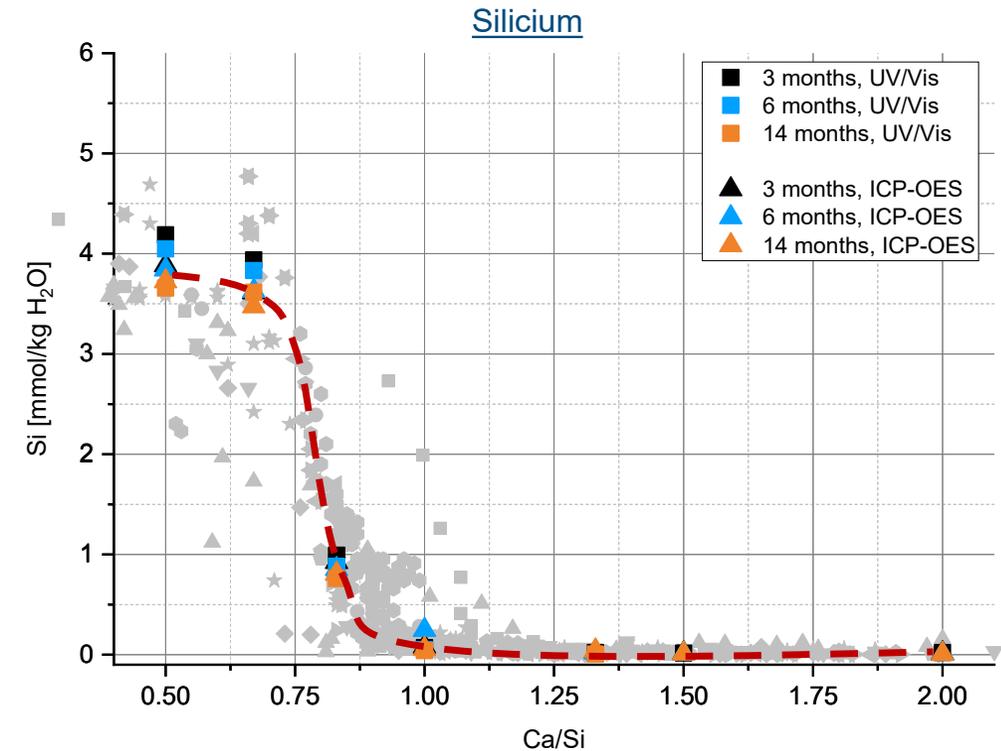
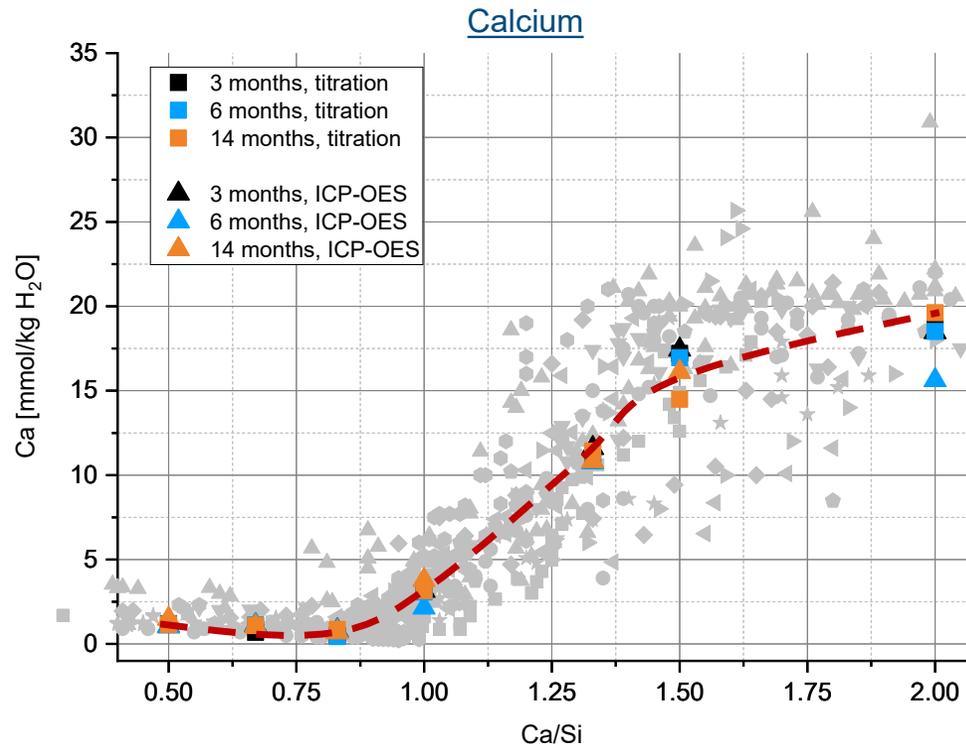
C-S-H in Wasser: $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$ bei 25 °C

- semikristalline C-S-H-Phasen; SiO_2 und $\text{Ca}(\text{OH})_2$ begrenzen $0.50 < \text{Ca}/\text{Si} < 2.00$ für C-S-H
- bekannte Ca/Si-Trends: Reflexverschiebungen in PXRD, sinkendes Q^2/Q^1 -Verhältnis in ^{29}Si -MAS-NMR

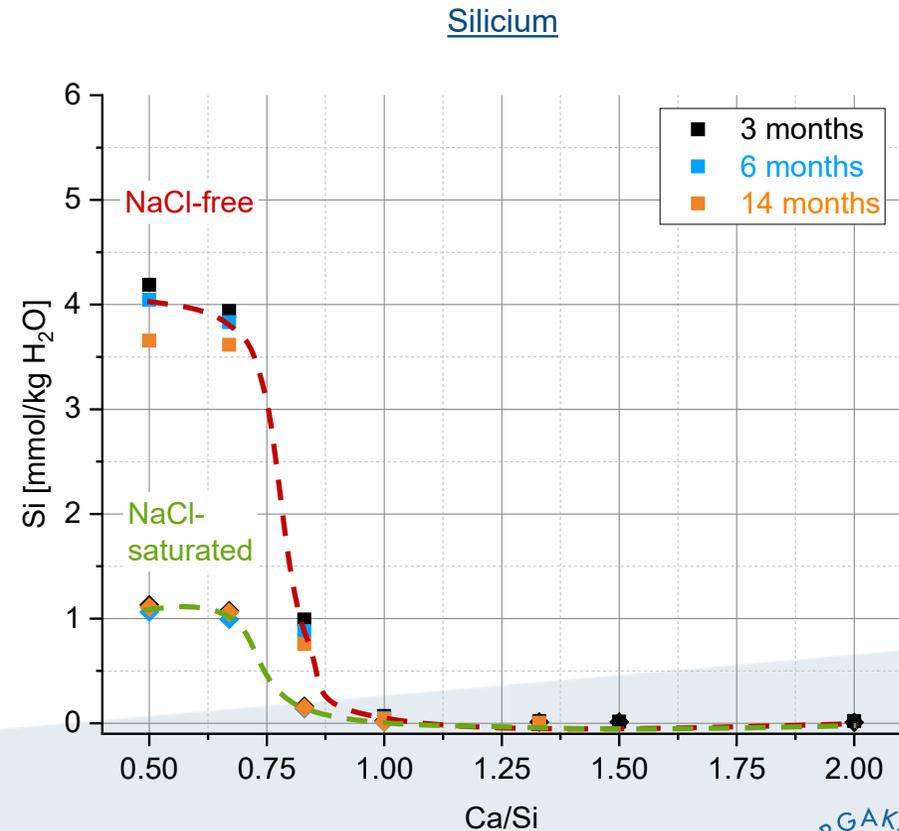
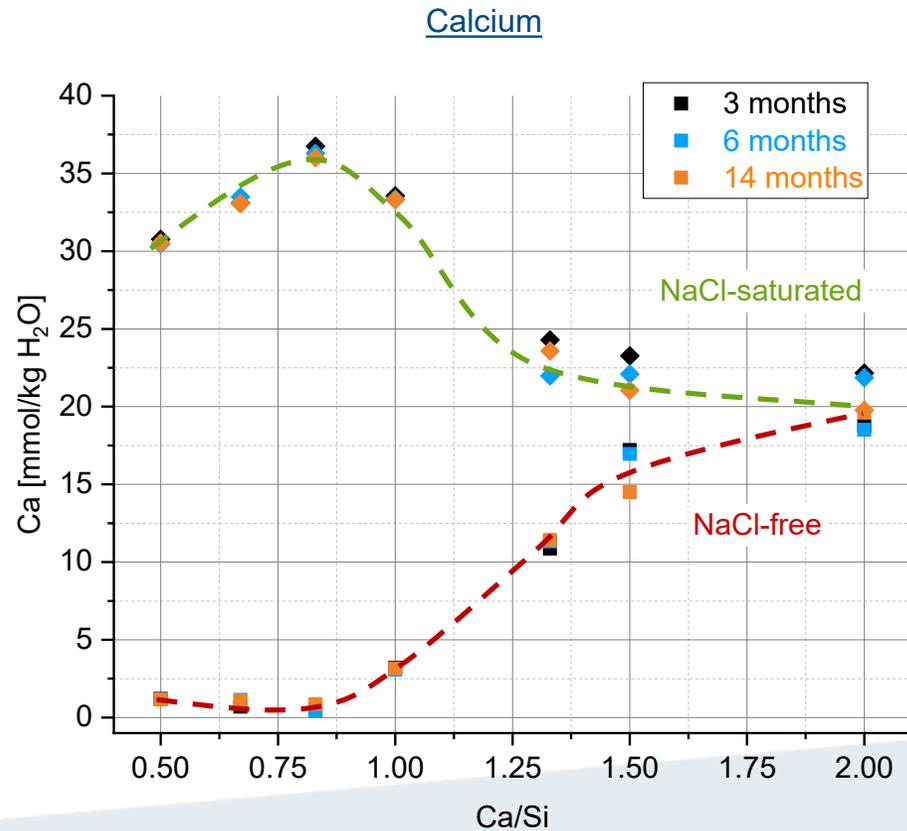


C-S-H in Wasser: $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$ bei 25 °C

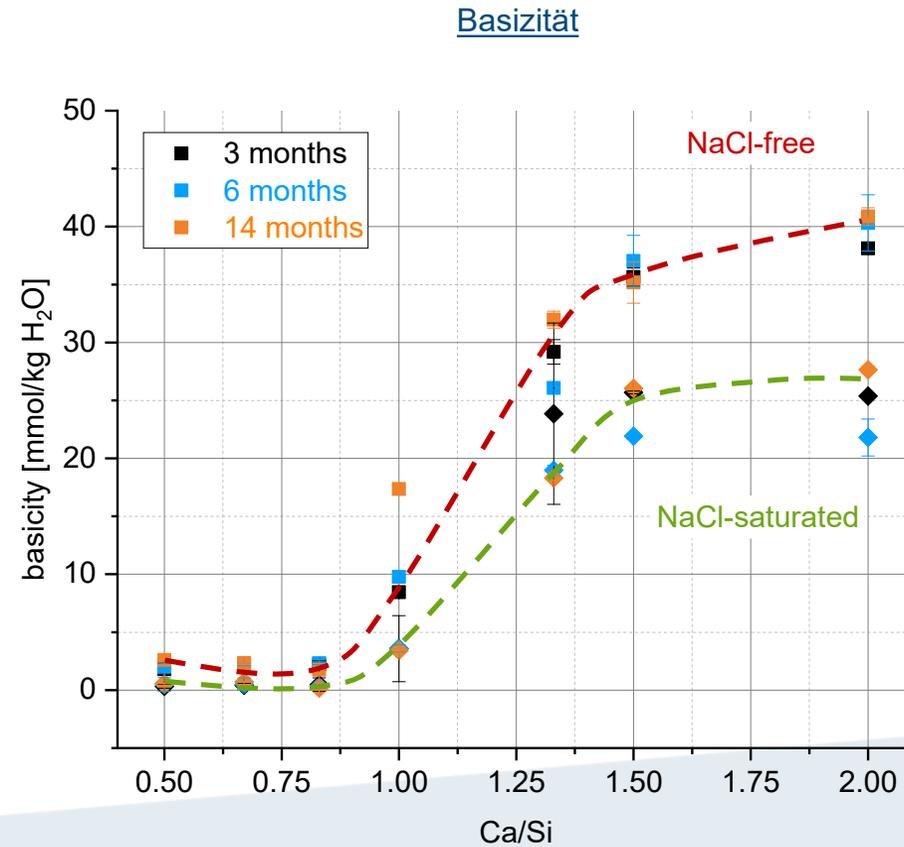
- Reproduzierbarkeit der Literaturtrends & Übereinstimmung von Lösungsanalysen mit vergleichender ICP-OES
- keine zeitabhängigen Änderungen → Beständigkeit trotz thermodynamischer Metastabilität von C-S-H



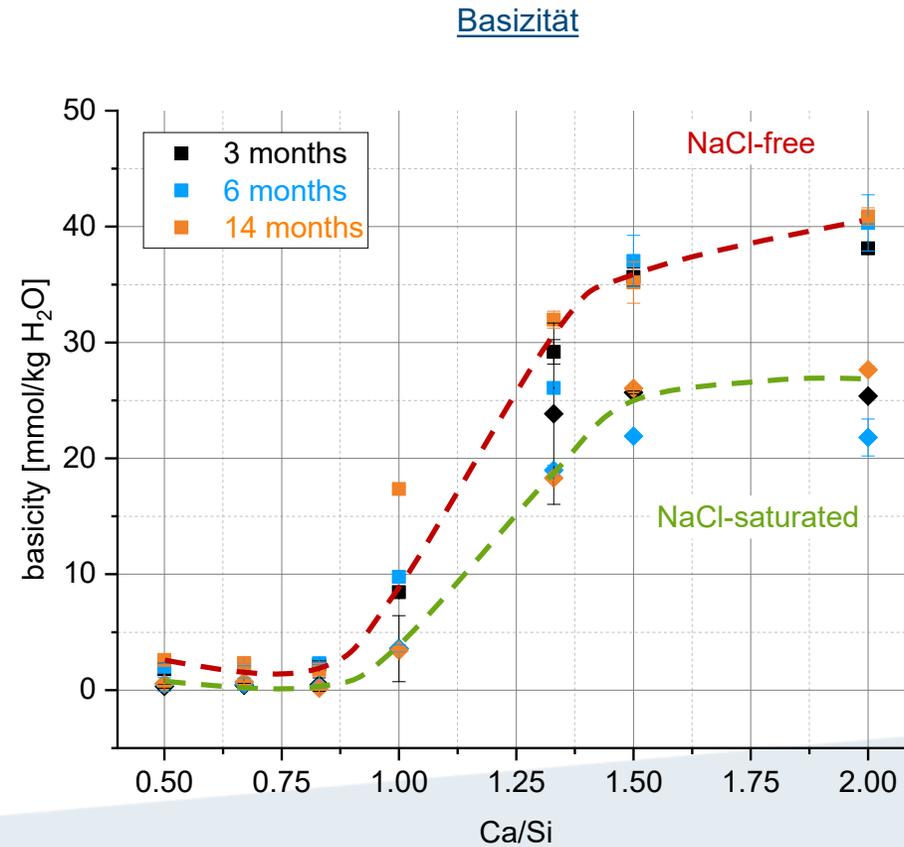
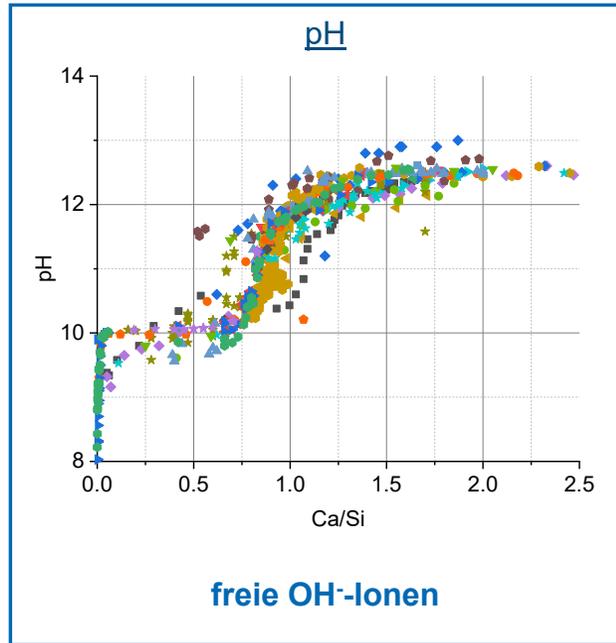
C-S-H in gesättigter NaCl-Lösung: $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ bei 25 °C



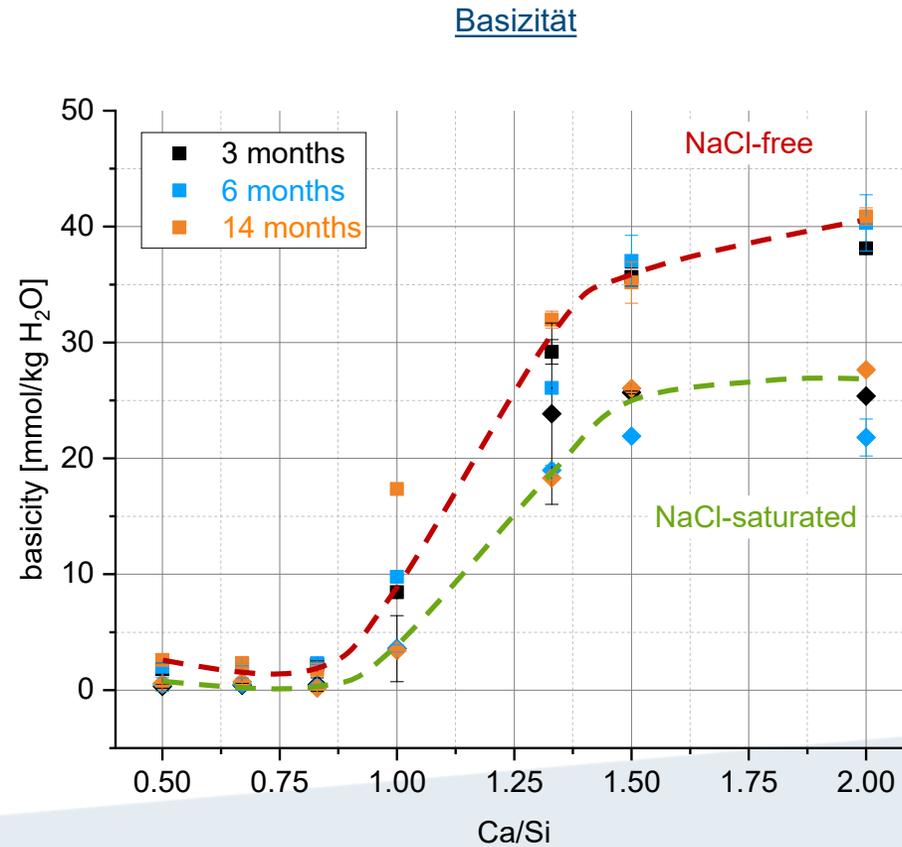
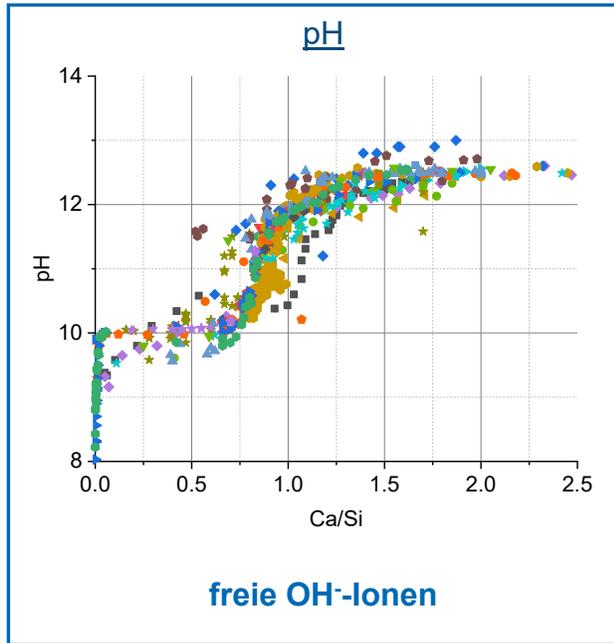
C-S-H in gesättigter NaCl-Lösung: $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ bei 25 °C



C-S-H in gesättigter NaCl-Lösung: $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ bei 25 °C



C-S-H in gesättigter NaCl-Lösung: $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ bei 25 °C



Basizität

= alle basisch reagierenden Spezies

freie OH-Ionen

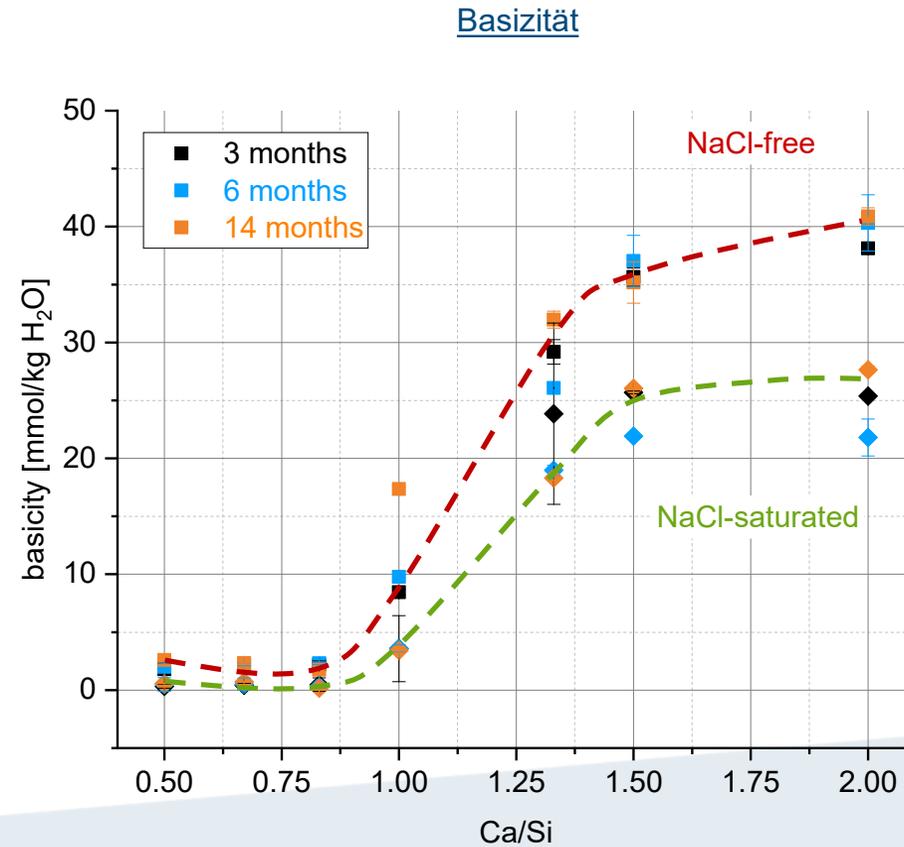
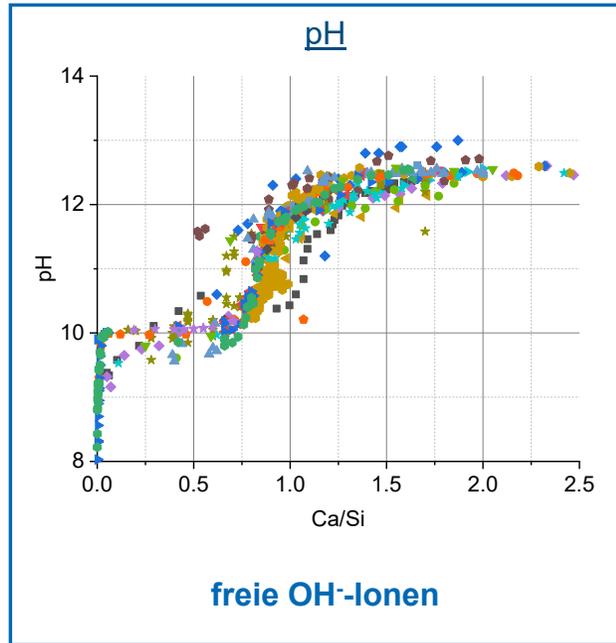
+

deprotonierte Kieselsäurespezies

$\text{SiO}(\text{OH})_3^-$, $\text{SiO}_2(\text{OH})_2^{2-}$,

$\text{CaSiO}(\text{OH})_3^+$, $\text{CaSiO}_2(\text{OH})_2$

C-S-H in gesättigter NaCl-Lösung: $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ bei 25 °C



Basizität

= alle basisch reagierenden Spezies

freie OH-Ionen

+

deprotonierte Kieselsäurespezies

$\text{SiO}(\text{OH})_3^-$, $\text{SiO}_2(\text{OH})_2^{2-}$,

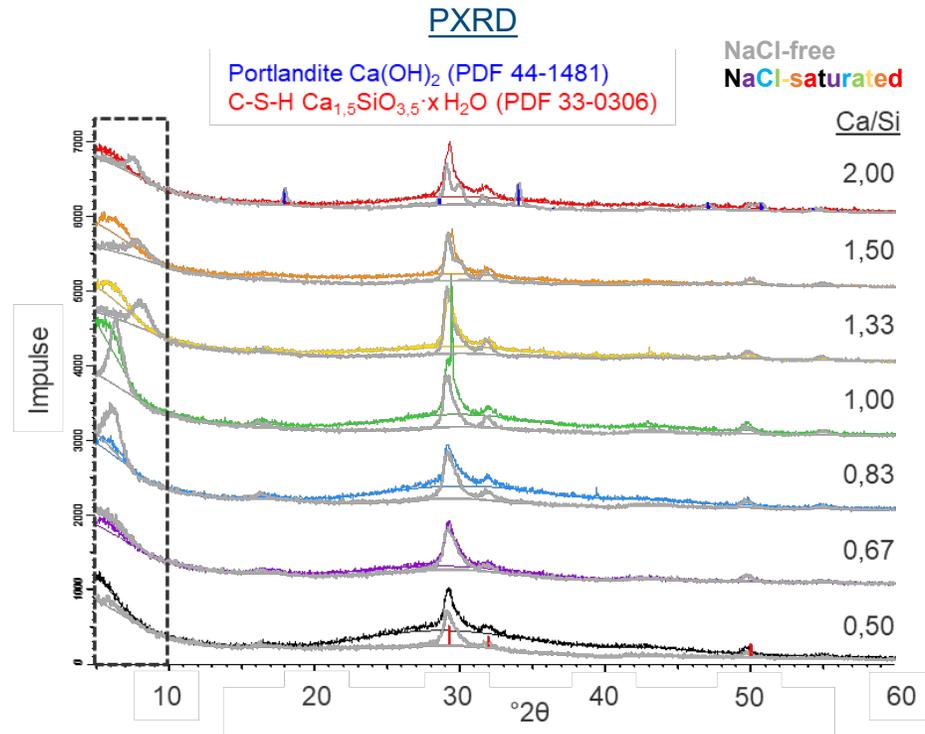
$\text{CaSiO}(\text{OH})_3^+$, $\text{CaSiO}_2(\text{OH})_2$

Werte von pH und Basizität hilfreich für Modellentwicklungen

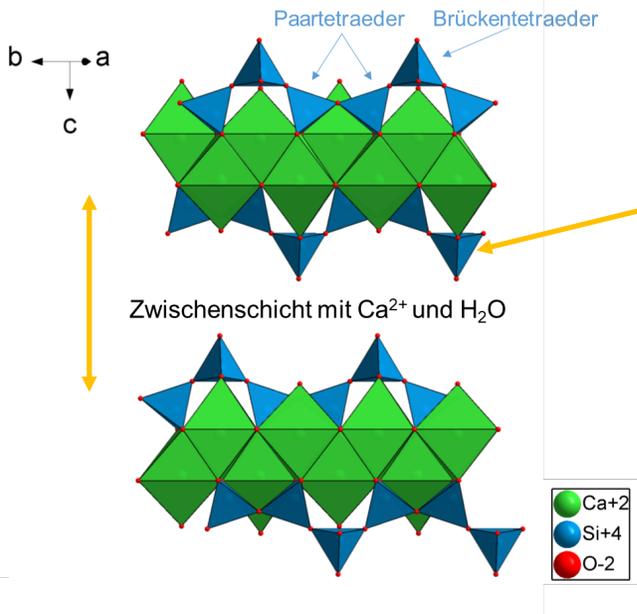
16 [Felix Häusler](#) und Daniela Freyer
 Löslichkeit von C-S-H-Phasen in NaCl-gesättigten Lösungen



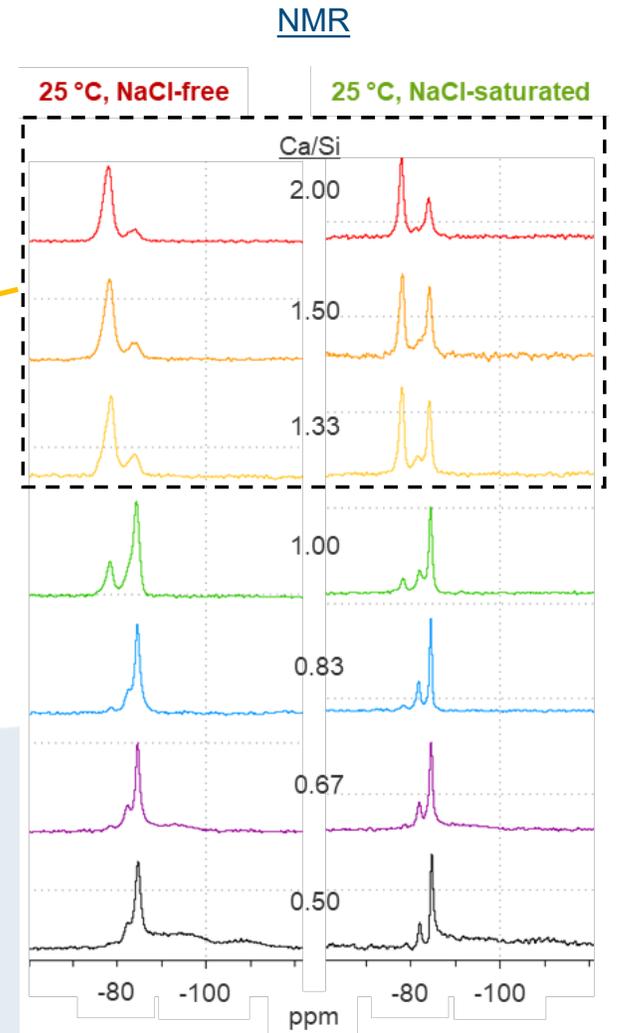
C-S-H in gesättigter NaCl-Lösung: $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ bei 25 °C



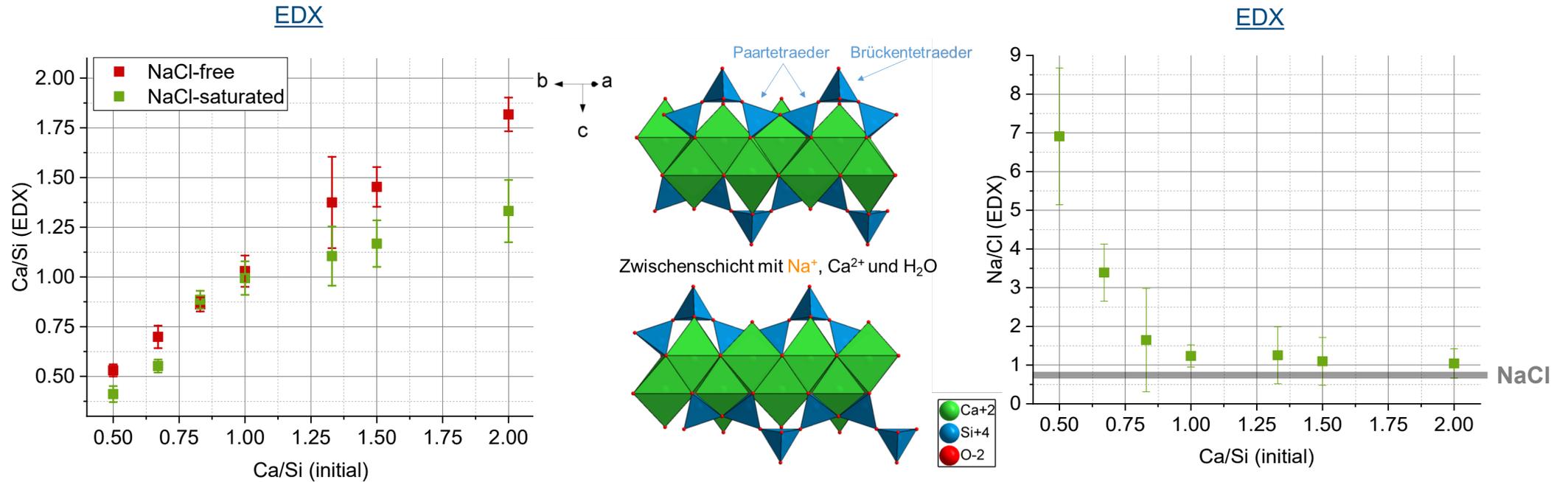
Schichtabstand
 unregelmäßige Schichtung



Q^2/Q^1 -Verhältnis \uparrow
 SiO_4 -Kettenlänge \uparrow
 Ca/Si-Verhältnis \downarrow



C-S-H in gesättigter NaCl-Lösung: $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ bei 25 °C

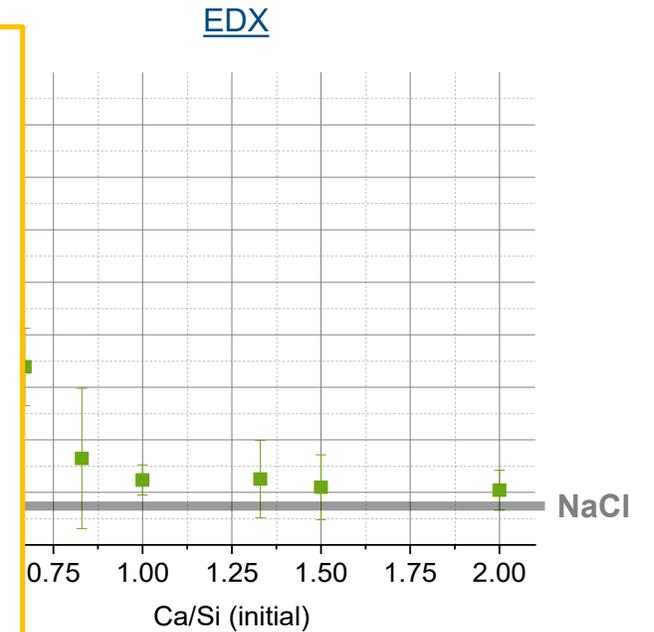
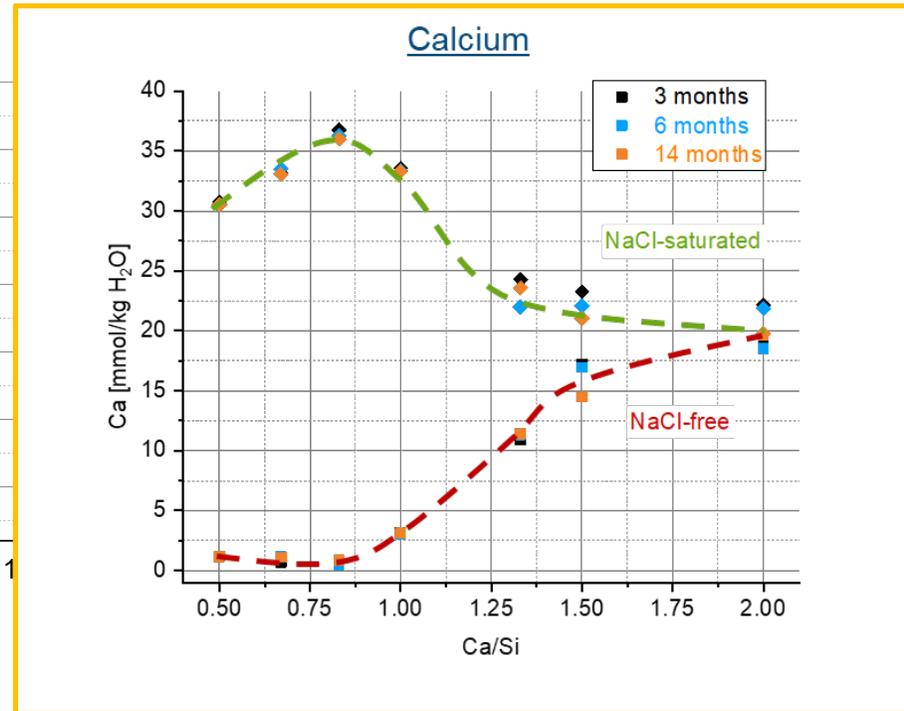
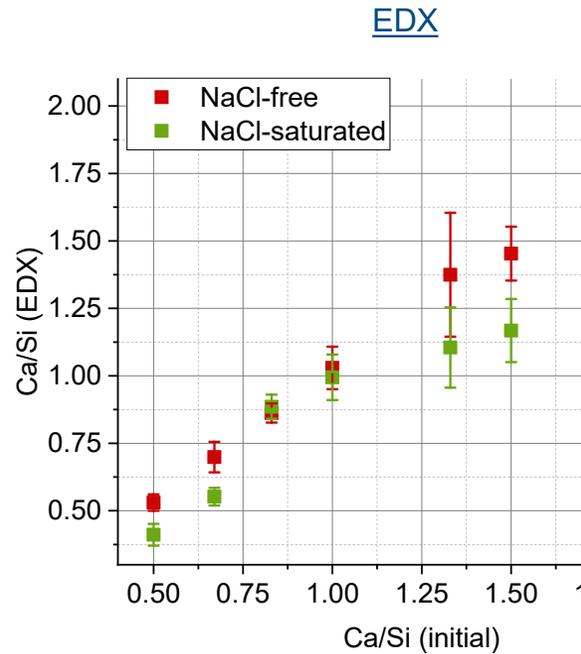


Ca/Si-Verhältnis ↓

Na⁺-Einbau abhängig von Ca/Si

Na⁺ vs. Ca²⁺
Ladungsausgleich

C-S-H in gesättigter NaCl-Lösung: $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ bei 25 °C



Ca/Si-Verhältnis ↓

Na⁺-Einbau abhängig von Ca/Si

Na⁺ vs. Ca²⁺
Ladungsausgleich

ThEREDA-Modellrechnungen: C-S-H-Mischphasenmodelle der Cemdata18

<u>Modell</u>	<u>Ca/Si</u>	<u>Modell</u>	<u>Ca/Si</u>
CSHQ		CSH-II	
○ $(\text{CaO})_{0,6667} \cdot \text{SiO}_2 \cdot 1,5 \text{ H}_2\text{O}$	0.67	○ $(\text{CaO})_{0,833333} \cdot \text{SiO}_2 \cdot 1,333333 \text{ H}_2\text{O}$	0.83
○ $(\text{CaO})_{0,833375} (\text{SiO}_2)_{0,6667} \cdot 1,833425 \text{ H}_2\text{O}$	1.25	○ $(\text{CaO})_{1,666667} \cdot \text{SiO}_2 \cdot 2,1 \text{ H}_2\text{O}$	1.67
○ $(\text{CaO})_{1,3333} \cdot \text{SiO}_2 \cdot 2,1667 \text{ H}_2\text{O}$	1.33	ECSH-1	
○ $(\text{CaO})_{1,5} (\text{SiO}_2)_{0,6667} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	2.25	○ $(\text{Ca}(\text{OH})_2)_{0,8333} \cdot \text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	0.83
○ $(\text{NaOH})_{0,5} (\text{SiO}_2)_{0,2} \cdot 0,2 \text{ H}_2\text{O}$	-----	○ $\text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	-----
CSH3T		○ $(\text{NaOH})_{0,5} (\text{SiO}_2)_{0,2} \cdot 0,2 \text{ H}_2\text{O}$	-----
○ $\text{CaO}(\text{SiO}_2)_{1,5} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	0.67	ECSH-2	
○ $(\text{CaO})_{1,25} (\text{SiO}_2)_{1,25} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	1.00	○ $(\text{Ca}(\text{OH})_2)_{0,8333} \cdot \text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	0.83
○ $(\text{CaO})_{1,5} \cdot \text{SiO}_2 \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	1.50	○ $(\text{Ca}(\text{OH})_2)_{1,00002} (\text{SiO}_2)_{0,6} \cdot 0,6 \text{ H}_2\text{O}$	1.67
CNASH		○ $(\text{NaOH})_{0,5} (\text{SiO}_2)_{0,2} \cdot 0,2 \text{ H}_2\text{O}$	-----
○ $\text{CaO}(\text{SiO}_2)_{1,5} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	0.67		
○ $(\text{CaO})_{1,25} (\text{SiO}_2)_{1,25} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	1.00		
○ $(\text{CaO})_{1,5} \cdot \text{SiO}_2 \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	1.50		
○ $(\text{CaO})(\text{SiO}_2)_{1,5} (\text{Na}_2\text{O})_{0,3125} \cdot 1,1875 \text{ H}_2\text{O}$	0.67		

ThEREDA-Modellrechnungen: C-S-H-Mischphasenmodelle der Cemdata18

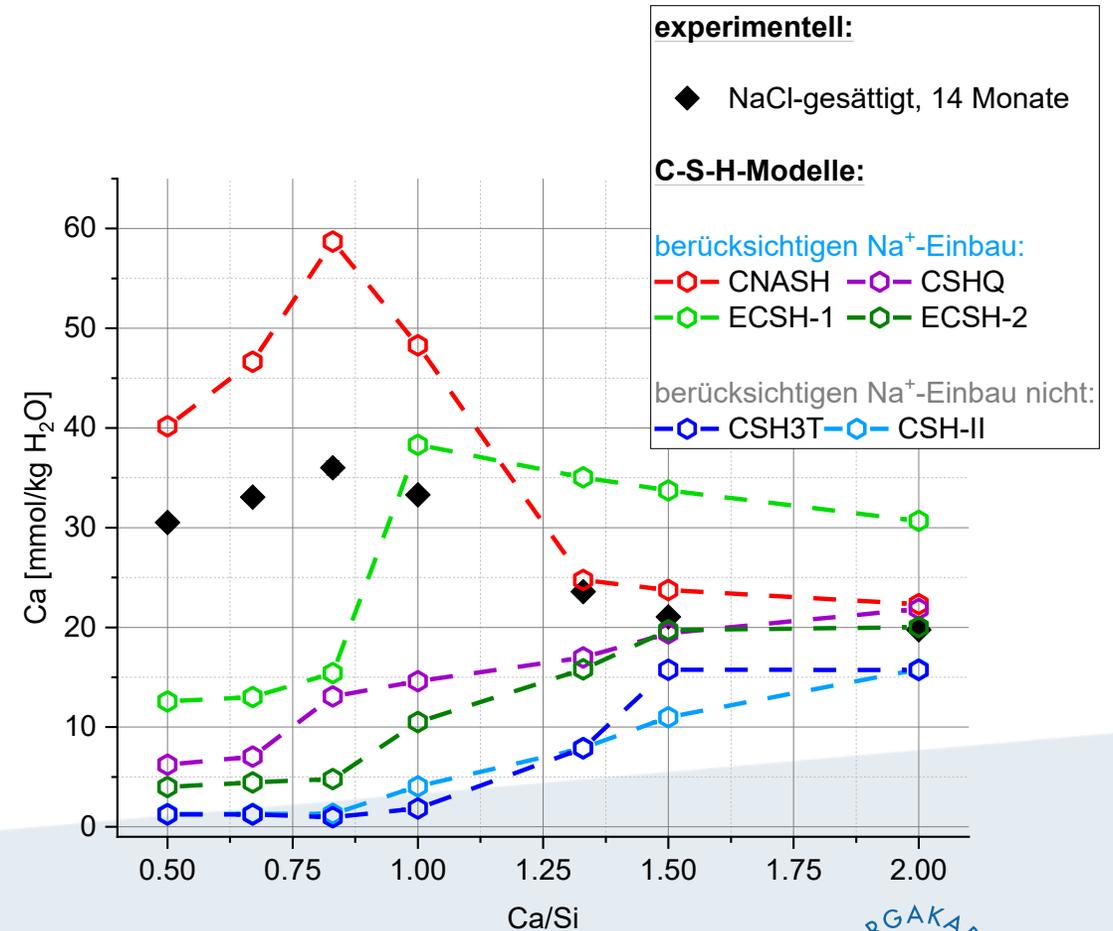
<u>Modell</u>	<u>Ca/Si</u>	<u>Modell</u>	<u>Ca/Si</u>
CSHQ		CSH-II	
○ $(\text{CaO})_{0,6667}\text{SiO}_2 \cdot 1,5 \text{ H}_2\text{O}$	0.67	○ $(\text{CaO})_{0,833333}\text{SiO}_2 \cdot 1,333333 \text{ H}_2\text{O}$	0.83
○ $(\text{CaO})_{0,833375}(\text{SiO}_2)_{0,6667} \cdot 1,833425 \text{ H}_2\text{O}$	1.25	○ $(\text{CaO})_{1,666667}\text{SiO}_2 \cdot 2,1 \text{ H}_2\text{O}$	1.67
○ $(\text{CaO})_{1,3333}\text{SiO}_2 \cdot 2,1667 \text{ H}_2\text{O}$	1.33	ECSH-1	
○ $(\text{CaO})_{1,5}(\text{SiO}_2)_{0,6667} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	2.25	○ $(\text{Ca}(\text{OH})_2)_{0,8333}\text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	0.83
○ $(\text{NaOH})_{0,5}(\text{SiO}_2)_{0,2} \cdot 0,2 \text{ H}_2\text{O}$	-----	○ $\text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	-----
CSH3T		○ $(\text{NaOH})_{0,5}(\text{SiO}_2)_{0,2} \cdot 0,2 \text{ H}_2\text{O}$	-----
○ $\text{CaO}(\text{SiO}_2)_{1,5} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	0.67	ECSH-2	
○ $(\text{CaO})_{1,25}(\text{SiO}_2)_{1,25} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	1.00	○ $(\text{Ca}(\text{OH})_2)_{0,8333}\text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	0.83
○ $(\text{CaO})_{1,5}\text{SiO}_2 \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	1.50	○ $(\text{Ca}(\text{OH})_2)_{1,00002}(\text{SiO}_2)_{0,6} \cdot 0,6 \text{ H}_2\text{O}$	1.67
CNASH		○ $(\text{NaOH})_{0,5}(\text{SiO}_2)_{0,2} \cdot 0,2 \text{ H}_2\text{O}$	-----
○ $\text{CaO}(\text{SiO}_2)_{1,5} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	0.67	Ca/Si-Bereich der Endglieder	
○ $(\text{CaO})_{1,25}(\text{SiO}_2)_{1,25} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	1.00		
○ $(\text{CaO})_{1,5}\text{SiO}_2 \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	1.50		
○ $(\text{CaO})(\text{SiO}_2)_{1,5}(\text{Na}_2\text{O})_{0,3125} \cdot 1,1875 \text{ H}_2\text{O}$	0.67		

TherEDA-Modellrechnungen: C-S-H-Mischphasenmodelle der Cemdata18

<u>Modell</u>	<u>Ca/Si</u>	<u>Modell</u>	<u>Ca/Si</u>
CSHQ		CSH-II	
○ $(\text{CaO})_{0,6667}\text{SiO}_2 \cdot 1,5 \text{ H}_2\text{O}$	0.67	○ $(\text{CaO})_{0,833333}\text{SiO}_2 \cdot 1,333333 \text{ H}_2\text{O}$	0.83
○ $(\text{CaO})_{0,833375}(\text{SiO}_2)_{0,6667} \cdot 1,833425 \text{ H}_2\text{O}$	1.25	○ $(\text{CaO})_{1,666667}\text{SiO}_2 \cdot 2,1 \text{ H}_2\text{O}$	1.67
○ $(\text{CaO})_{1,3333}\text{SiO}_2 \cdot 2,1667 \text{ H}_2\text{O}$	1.33	ECSH-1	
○ $(\text{CaO})_{1,5}(\text{SiO}_2)_{0,6667} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	2.25	○ $(\text{Ca}(\text{OH})_2)_{0,8333}\text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	0.83
○ $(\text{NaOH})_{0,5}(\text{SiO}_2)_{0,2} \cdot 0,2 \text{ H}_2\text{O}$	-----	○ $\text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	-----
CSH3T		○ $(\text{NaOH})_{0,5}(\text{SiO}_2)_{0,2} \cdot 0,2 \text{ H}_2\text{O}$	-----
○ $\text{CaO}(\text{SiO}_2)_{1,5} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	0.67	ECSH-2	
○ $(\text{CaO})_{1,25}(\text{SiO}_2)_{1,25} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	1.00	○ $(\text{Ca}(\text{OH})_2)_{0,8333}\text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	0.83
○ $(\text{CaO})_{1,5}\text{SiO}_2 \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	1.50	○ $(\text{Ca}(\text{OH})_2)_{1,00002}(\text{SiO}_2)_{0,6} \cdot 0,6 \text{ H}_2\text{O}$	1.67
CNASH		○ $(\text{NaOH})_{0,5}(\text{SiO}_2)_{0,2} \cdot 0,2 \text{ H}_2\text{O}$	-----
○ $\text{CaO}(\text{SiO}_2)_{1,5} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	0.67	Ca/Si-Bereich der Endglieder	
○ $(\text{CaO})_{1,25}(\text{SiO}_2)_{1,25} \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	1.00	Mischphasenbildung unter Berücksichtigung von Na⁺	
○ $(\text{CaO})_{1,5}\text{SiO}_2 \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$	1.50		
○ $(\text{CaO})(\text{SiO}_2)_{1,5}(\text{Na}_2\text{O})_{0,3125} \cdot 1,1875 \text{ H}_2\text{O}$	0.67		

Experimentelle Ergebnisse vs. THEREDA-Modellrechnungen

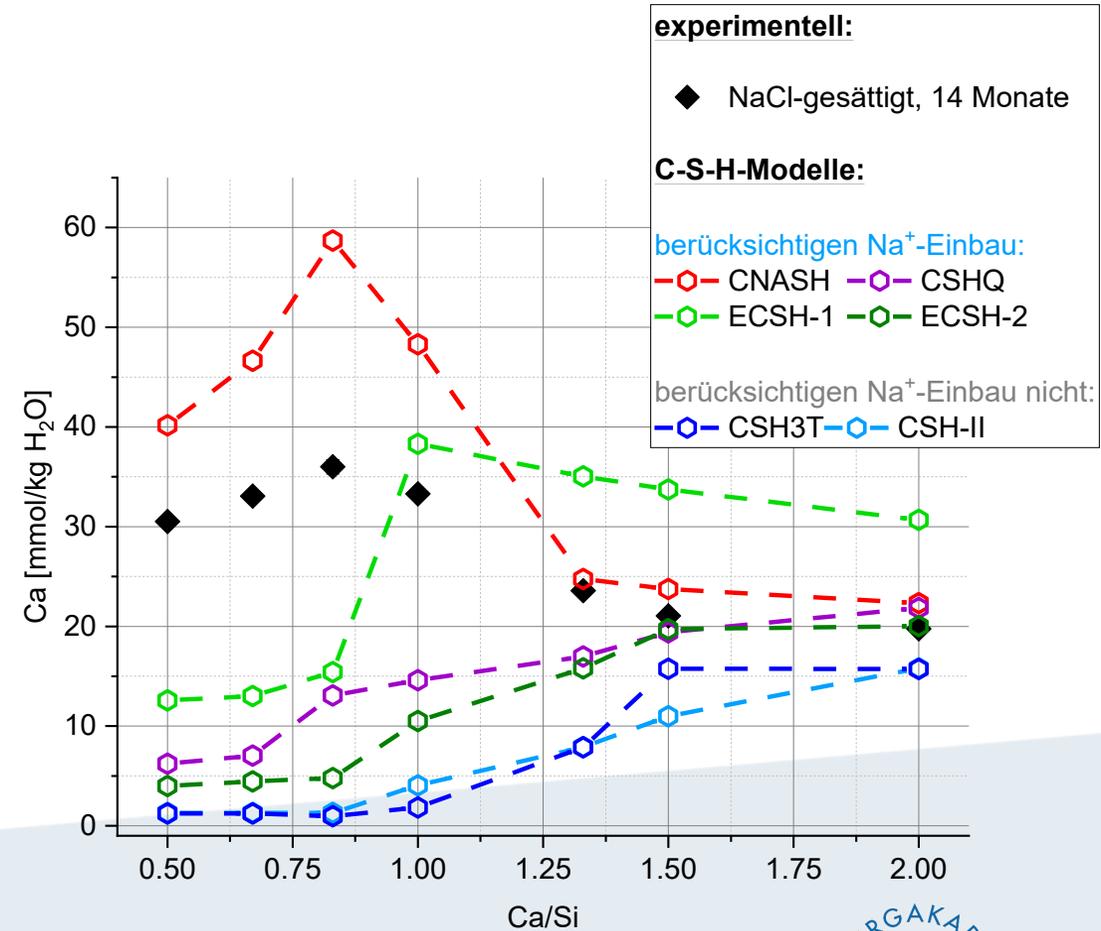
- C-S-H-Mischphasenmodelle in THEREDA integriert
 - erlaubt Vorhersagen bei hohen Salzkonzentrationen
- vergleichende Modellrechnungen
 - **CNASH-Modell** gibt Trend bei NaCl-Sättigung grundlegend wieder
 - deutliche Abweichungen zwischen Modellen
 - **Na⁺-Einbau** in C-S-H entscheidend
- Validierung für THEREDA (in Zukunft)



Experimentelle Ergebnisse vs. THEREDA-Modellrechnungen

- C-S-H-Mischphasenmodelle in THEREDA integriert
 - erlaubt Vorhersagen bei hohen Salzkonzentrationen
- vergleichende Modellrechnungen
 - **CNASH-Modell** gibt Trend bei NaCl-Sättigung grundlegend wieder
 - deutliche Abweichungen zwischen Modellen
 - **Na⁺-Einbau** in C-S-H entscheidend
- Validierung für THEREDA (in Zukunft)

Entwicklung Cemdata18 im folgenden Vortrag:
Dan Miron: CEMDATA18/THEREDA and ongoing development to C(A)SH model(s)



Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H

Vorbereitung kompakter Probekörper

- $\text{Ca}(\text{OH})_2$ + amorphes SiO_2 in H_2O / ges. NaCl-Lösung
 - C-S-H-Zement
 - C-S-H + NaCl: Salzbeton
- $\text{Ca}/\text{Si} = 0.50, 1.00$ und 2.00 ; $\text{Wasser}/\text{Feststoff} < 2$
- Abbinden über 3 Monate bei $25\text{ }^\circ\text{C}$



Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H

Vorbereitung kompakter Probekörper

- $\text{Ca}(\text{OH})_2$ + amorphes SiO_2 in H_2O / ges. NaCl-Lösung
 - C-S-H-Zement
 - C-S-H + NaCl: Salzbeton
- Ca/Si = 0.50, 1.00 und 2.00; Wasser/Feststoff < 2
- Abbinden über 3 Monate bei 25 °C

Wechselwirkung der Probekörper mit Salzlösungen

- nach Abbinden: für 2 Jahre in Salzlösungen gelagert
 - gesättigte NaCl-Lösung
 - NaCl-gesättigte, 4 molale MgCl_2 -Lösung
- Festphasen- (PXRD, RFA) und Lösungsanalytik (Ca, Na, Mg, Cl)
- hohe Porosität (17-60 %)
→ vollständiges Eindringen der Lösung



Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H

Vorbereitung kompakter Probekörper

- $\text{Ca}(\text{OH})_2$ + amorphes SiO_2 in H_2O / ges. NaCl-Lösung
 - C-S-H-Zement
 - C-S-H + NaCl: Salzbeton
- Ca/Si = 0.50, 1.00 und 2.00; Wasser/Feststoff < 2
- Abbinden über 3 Monate bei 25 °C

Lösung	gesättigte NaCl		NaCl-ges., 4 molale MgCl_2	
Probe-körper	0.50	0.50_NaCl	0.50	0.50_NaCl
	1.00	1.00_NaCl	1.00	1.00_NaCl
	2.00	2.00_NaCl	2.00	2.00_NaCl

Wechselwirkung der Probekörper mit Salzlösungen

- nach Abbinden: für 2 Jahre in Salzlösungen gelagert
 - gesättigte NaCl-Lösung
 - NaCl-gesättigte, 4 molale MgCl_2 -Lösung
- Festphasen- (PXRD, RFA) und Lösungsanalytik (Ca, Na, Mg, Cl)
- hohe Porosität (17-60 %)
 - vollständiges Eindringen der Lösung

Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H

Vorbereitung kompakter Probekörper

- $\text{Ca}(\text{OH})_2$ + amorphes SiO_2 in H_2O / ges. NaCl-Lösung
 - C-S-H-Zement
 - C-S-H + NaCl: Salzbeton
- $\text{Ca}/\text{Si} = 0.50, 1.00$ und 2.00 ; $\text{Wasser}/\text{Feststoff} < 2$
- Abbinden über 3 Monate bei $25\text{ }^\circ\text{C}$

Wechselwirkung der Probekörper mit Salzlösungen

- nach Abbinden: für 2 Jahre in Salzlösungen gelagert
 - gesättigte NaCl-Lösung
 - NaCl-gesättigte, 4 molale MgCl_2 -Lösung
- Festphasen- (PXR, RFA) und Lösungsanalytik (Ca, Na, Mg, Cl)
- hohe Porosität (17-60 %)
 - vollständiges Eindringen der Lösung

Lösung	gesättigte NaCl		NaCl-ges., 4 molale MgCl_2	
Probekörper	0.50 1.00 2.00	0.50_NaCl 1.00_NaCl 2.00_NaCl	0.50 1.00 2.00	0.50_NaCl 1.00_NaCl 2.00_NaCl
Zustand der Probekörper				
Lösung	Kontaktlösung + Porenlösung			

Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H

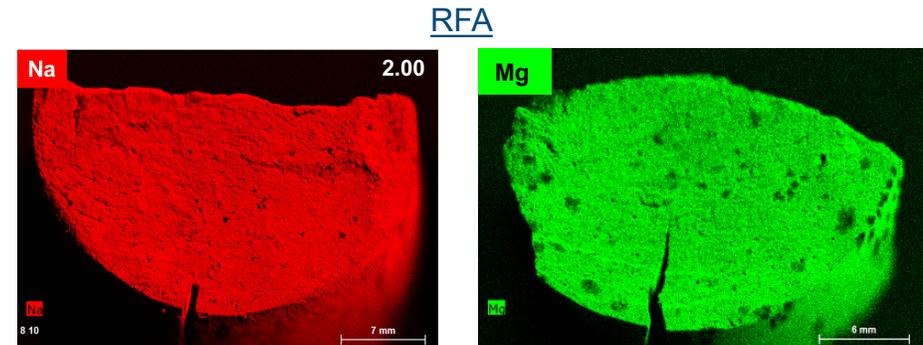
Vorbereitung kompakter Probekörper

- $\text{Ca}(\text{OH})_2$ + amorphes SiO_2 in H_2O / ges. NaCl-Lösung
 - C-S-H-Zement
 - C-S-H + NaCl: Salzbeton
- Ca/Si = 0.50, 1.00 und 2.00; Wasser/Feststoff < 2
- Abbinden über 3 Monate bei 25 °C

Wechselwirkung der Probekörper mit Salzlösungen

- nach Abbinden: für 2 Jahre in Salzlösungen gelagert
 - gesättigte NaCl-Lösung
 - NaCl-gesättigte, 4 molale MgCl_2 -Lösung
- Festphasen- (PXR, RFA) und Lösungsanalytik (Ca, Na, Mg, Cl)
- hohe Porosität (17-60 %)
 - **vollständiges Eindringen der Lösung**

Lösung	gesättigte NaCl		NaCl-ges., 4 molale MgCl_2	
Probekörper	0.50	0.50_NaCl	0.50	0.50_NaCl
	1.00	1.00_NaCl	1.00	1.00_NaCl
	2.00	2.00_NaCl	2.00	2.00_NaCl
Zustand der Probekörper	vollständiges Eindringen der Kontaktlösung			
Lösung	Kontaktlösung + Porenlösung			



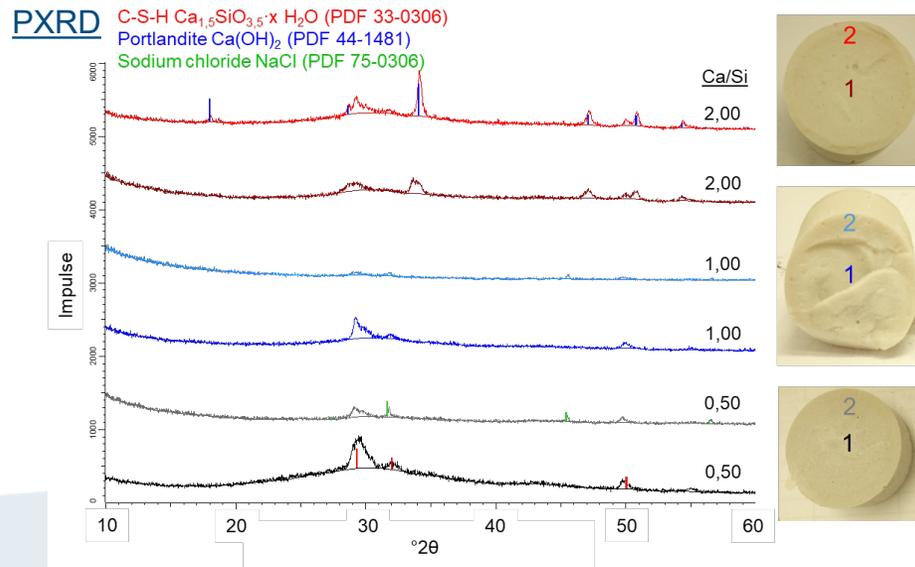
Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H – gesättigte NaCl-Lösung

- über 24 Monate keine optische Änderung der Probekörper



Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H – gesättigte NaCl-Lösung

- über 24 Monate keine optische Änderung der Probekörper
- PXRD: semikristalline C-(N)-S-H-Phasen



31

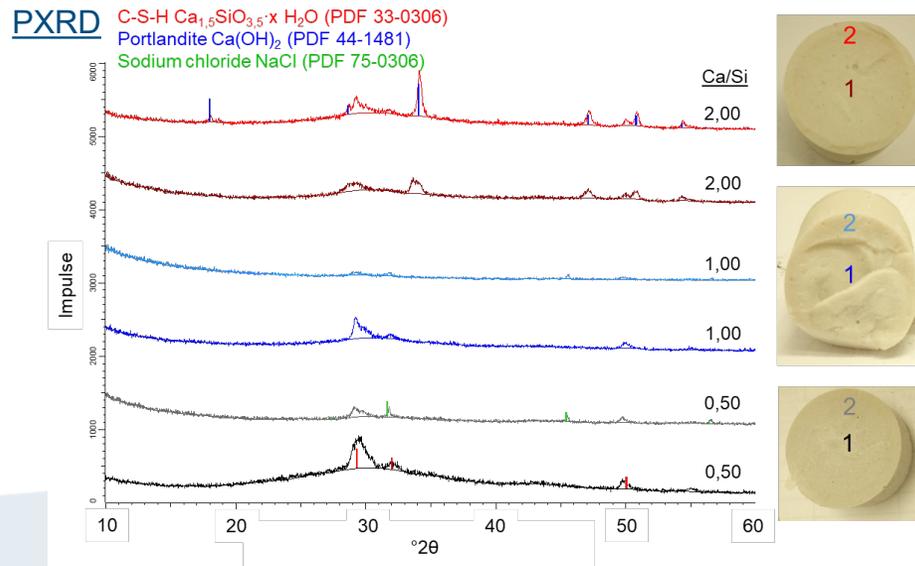
Felix Häusler und Daniela Freyer

Löslichkeit von C-S-H-Phasen in NaCl-gesättigten Lösungen



Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H – gesättigte NaCl-Lösung

- über 24 Monate keine optische Änderung der Probekörper
- PXRD: semikristalline C-(N)-S-H-Phasen
- Verdünnung der Kontaktlösung durch C-S-H-Porenlösung



Lösungsanalytik

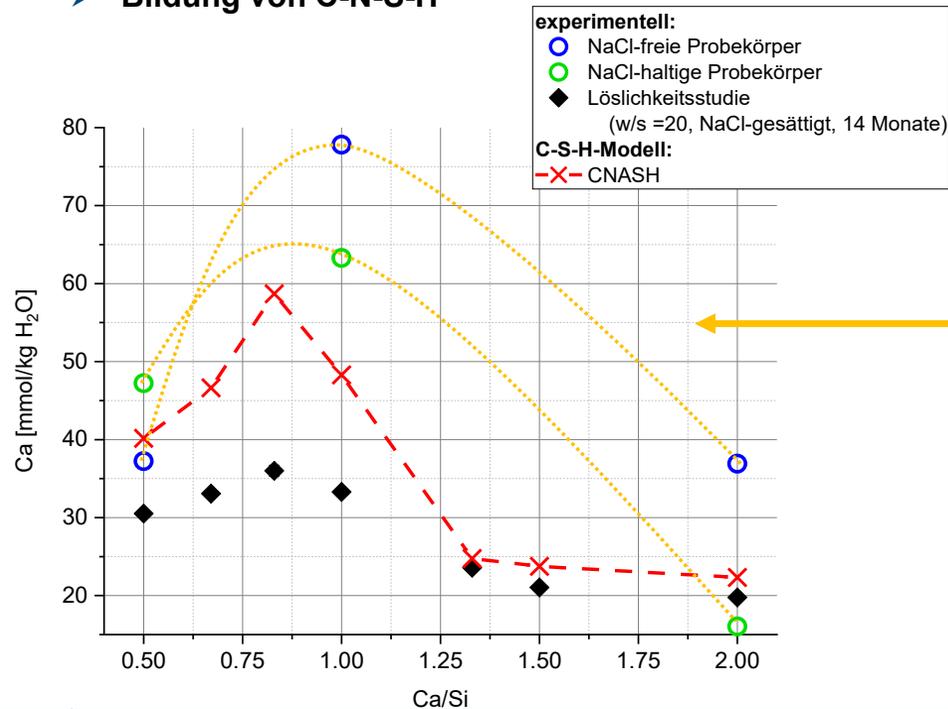
Probekörper	Ca ²⁺ [mmol/kg H ₂ O]	Na ⁺ [mol/kg H ₂ O]	Cl ⁻ [mol/kg H ₂ O]	Festphasenbestand (PXRD)
0.50	37.23	3.86	3.96	C-N-S-H
1.00	77.81	3.57	3.77	C-N-S-H
2.00	36.91	3.54	3.59	C-N-S-H, Ca(OH) ₂
0.50_NaCl	47.22	5.91	6.04	C-N-S-H, NaCl
1.00_NaCl	63.30	5.93	6.06	C-N-S-H, NaCl
2.00_NaCl	16.05	6.06	6.03	C-N-S-H, Ca(OH) ₂ , NaCl
analyt. Abweich.	0.32-1.56	0.09-0.15	0.04-0.06	

Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H – gesättigte NaCl-Lösung

- über 24 Monate keine optische Änderung der Probekörper
- PXRD: semikristalline C-(N)-S-H-Phasen
- Verdünnung der Kontaktlösung durch C-S-H-Porenlösung
- Ca^{2+} -Konzentration zeigt Trend der Löslichkeitsstudien



➤ Bildung von C-N-S-H



Lösungsanalytik

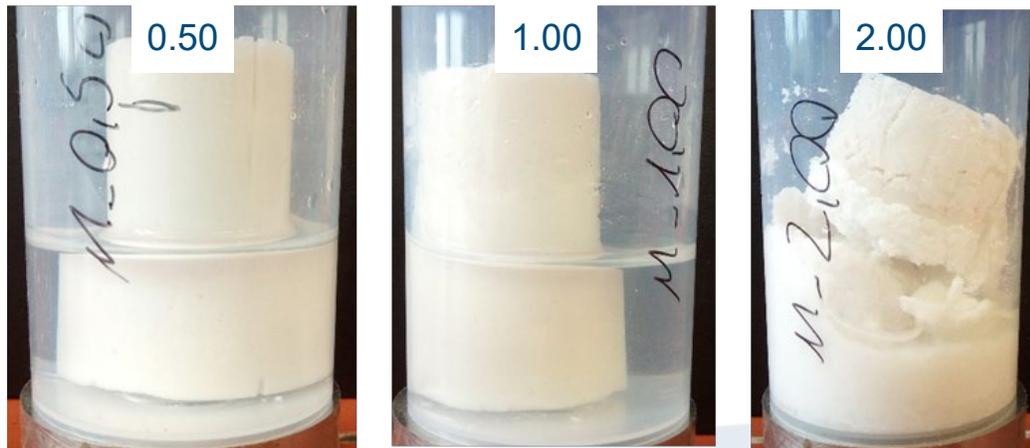
Probekörper	Ca^{2+} [mmol/kg H_2O]	Na^+ [mol/kg H_2O]	Cl^- [mol/kg H_2O]	Festphasenbestand (PXRD)
0.50	37.23	3.86	3.96	C-N-S-H
1.00	77.81	3.57	3.77	C-N-S-H
2.00	36.91	3.54	3.59	C-N-S-H, $\text{Ca}(\text{OH})_2$
0.50_NaCl	47.22	5.91	6.04	C-N-S-H, NaCl
1.00_NaCl	63.30	5.93	6.06	C-N-S-H, NaCl
2.00_NaCl	16.05	6.06	6.03	C-N-S-H, $\text{Ca}(\text{OH})_2$, NaCl
analyt. Abweich.	0.32-1.56	0.09-0.15	0.04-0.06	



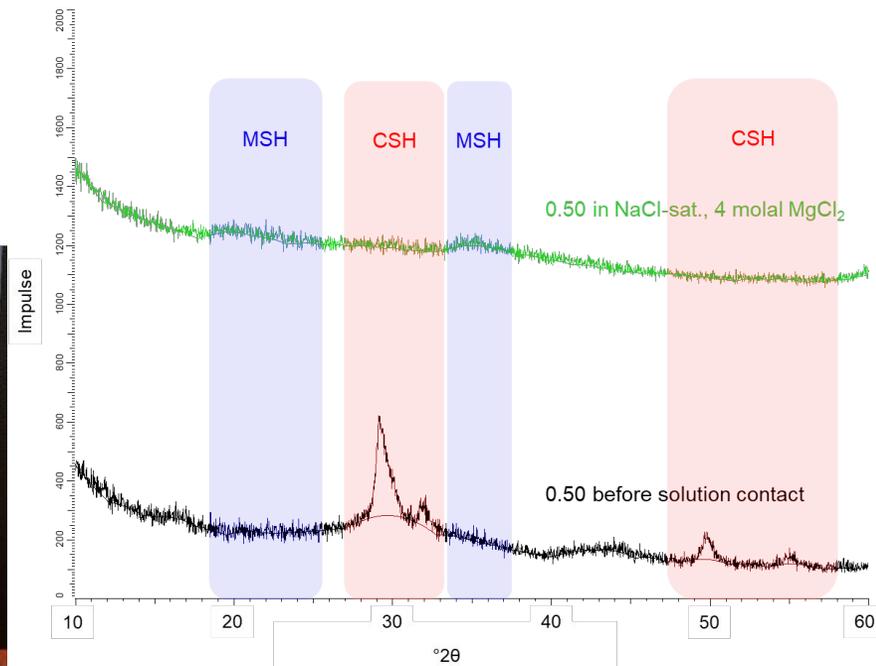
Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H – NaCl-ges., 4 molale MgCl₂-Lösung

NaCl-freie Probekörper:

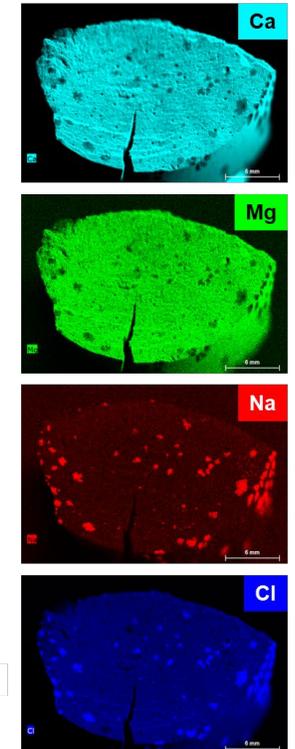
- Ca/Si = 0.50 + 1.00: bleiben intakt
- Ca/Si = 2.00: schnelles Zerfallen
- alle Proben: C-S-H + Mg²⁺ → M-S-H + Ca²⁺
- für 2.00: Ca(OH)₂ + Mg²⁺ → Mg(OH)₂ + Ca²⁺



PXRD Ca/Si = 0.50



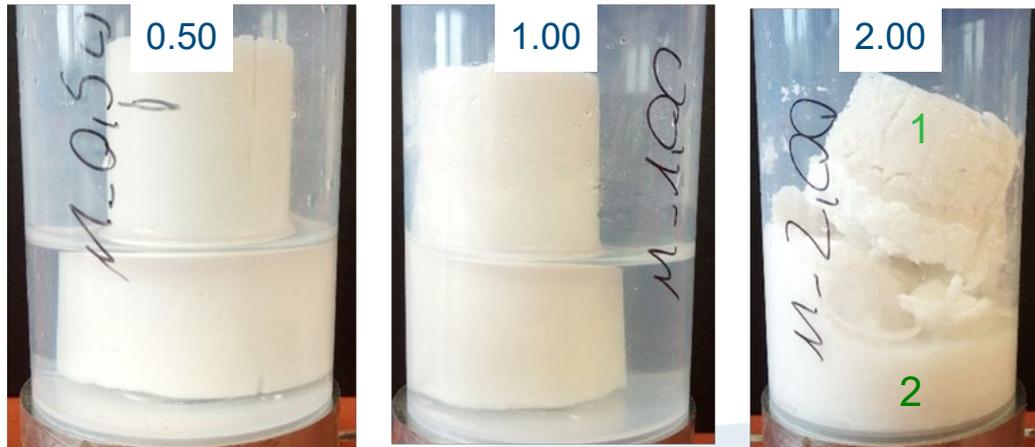
RFA



Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H – NaCl-ges., 4 molale MgCl₂-Lösung

NaCl-freie Probekörper:

- Ca/Si = 0.50 + 1.00: bleiben intakt
- Ca/Si = 2.00: schnelles Zerfallen
- alle Proben: C-S-H + Mg²⁺ → M-S-H + Ca²⁺
- für 2.00: Ca(OH)₂ + Mg²⁺ → Mg(OH)₂ + Ca²⁺

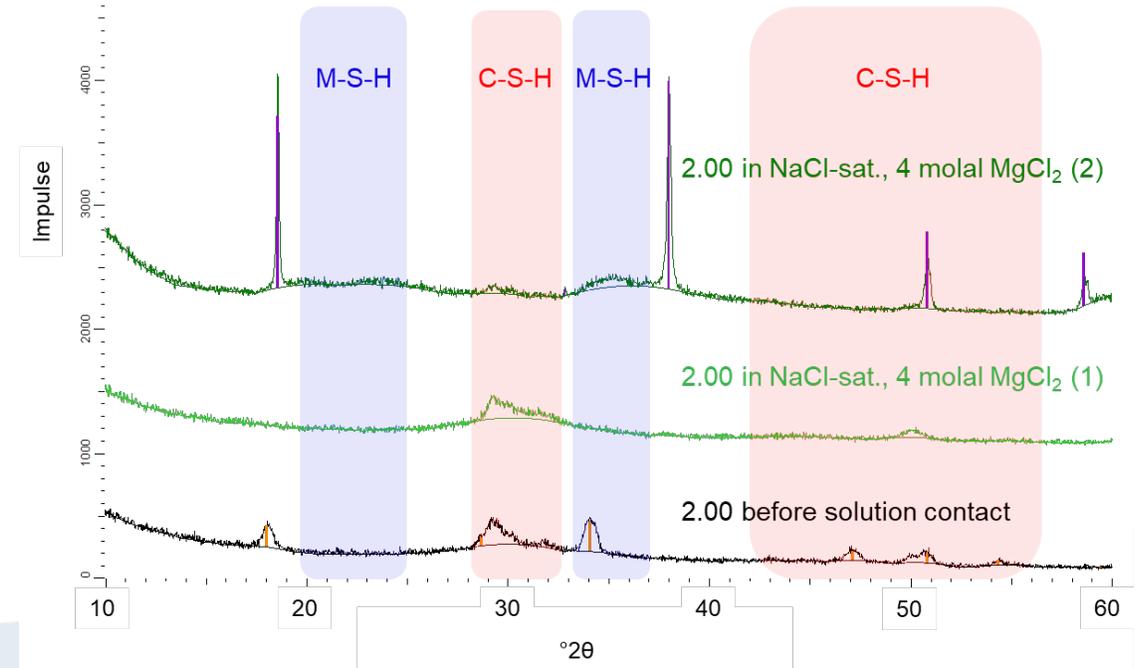


PXRD

Ca/Si = 2.00

Portlandite Ca(OH)₂ (PDF 44-1481)

Brucite Mg(OH)₂ (PDF 83-0114)



Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H – NaCl-ges., 4 molale MgCl₂-Lösung

NaCl-freie Probekörper:

- Ca/Si = 0.50 + 1.00: bleiben intakt
- Ca/Si = 2.00: schnelles Zerfallen
- alle Proben: C-S-H + Mg²⁺ → M-S-H + Ca²⁺
- für 2.00: Ca(OH)₂ + Mg²⁺ → Mg(OH)₂ + Ca²⁺

NaCl-haltige Probekörper: alle zerfallen

- alle Proben: C-N-S-H + Mg²⁺ → M-(N-)S-H + Ca²⁺
- für 2.00: Ca(OH)₂ + Mg²⁺ → Mg(OH)₂ + Ca²⁺

→ Änderung der Lösungszusammensetzung

→ **Untersättigung an NaCl in Kontaktlösung**

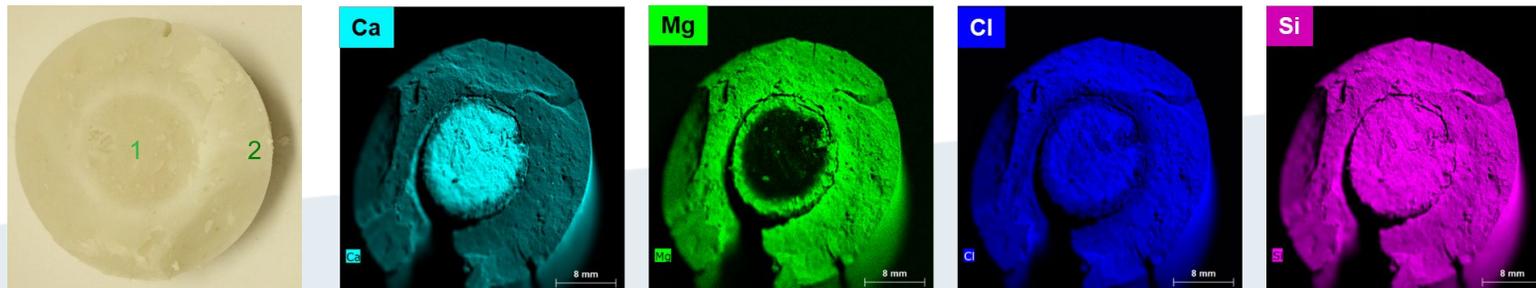


Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H – NaCl-ges., 4 molale MgCl₂-Lösung

Lösungsanalytik

Probekörper	Mg ²⁺ [mol/kg H ₂ O]	Ca ²⁺ [mol/kg H ₂ O]	Na ⁺ [mol/kg H ₂ O]	Cl ⁻ [mol/kg H ₂ O]	Festphasenbestand (XRD)
0.50	0.04	1.92	0.23	4.09	M-S-H
1.00	0.01	1.92	0.23	4.06	C-N-S-H, M-S-H
2.00	< detection limit	1.82	0.25	3.88	C-N-S-H, M-S-H, Mg(OH) ₂
0.50_NaCl	0.02	1.86	2.88	6.74	C-N-S-H, M-S-H
1.00_NaCl	0.01	1.87	2.86	6.76	C-N-S-H, M-S-H
2.00_NaCl	< detection limit	1.52	3.38	6.56	C-N-S-H, M-S-H, Ca(OH) ₂ , Mg(OH) ₂
analyt. Abweichung	< 0.01	0.03-0.04	0.01-0.08	0.04-0.07	

RFA



37

[Felix Häusler](#) und Daniela Freyer

Löslichkeit von C-S-H-Phasen in NaCl-gesättigten Lösungen



Einfluss von Salzlösungen auf C-(N)-S-H

- Reaktionen zwischen Probekörpern und Kontaktlösungen
- **NaCl**: Einbau von Na^+ in C-S-H
- **MgCl₂**: Umwandlung von C-S-H zu M-S-H; Anwesenheit von $\text{Ca}(\text{OH})_2$ und NaCl im Probekörper führt durch Löseprozesse zur Zerstörung
- poröse Probekörper, Grundsystem $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$
 - chemisches Verständnis ablaufender Prozesse
 - reale Zement-Rezeptur
 - weniger poröser Baustoff
 - Stoffsysteme sind komplexer (Al^{3+} , $\text{Fe}^{2+/3+}$, ...)
 - aktuell: Versuche mit M4-Salzbeton

Lösung	gesättigte NaCl		NaCl-ges., 4 molale MgCl ₂	
Probekörper	0.50 1.00 2.00	0.50_NaCl 1.00_NaCl 2.00_NaCl	0.50 1.00 2.00	0.50_NaCl 1.00_NaCl 2.00_NaCl
Zustand der Probekörper	vollständiges Eindringen der Kontaktlösung			
Lösung Kontaktlösung + Porenlösung	Einbau von Na^+ in C-S-H unter Abgabe von Ca^{2+} in Lösung; keine Veränderung der PK beobachtet		C-(N)-S-H → M-S-H und (falls vorhanden) $\text{Ca}(\text{OH})_2 \rightarrow \text{Mg}(\text{OH})_2$; Schädigung der Probekörper mit $\text{Ca}(\text{OH})_2$ und/oder NaCl	
	Erhöhung der Ca^{2+} -Konzentration; NaCl-freie Probekörper: Verdünnung NaCl-gesättigter Kontaktlösung durch Mischung mit Porenlösung		äquimolarer Austausch von Mg^{2+} und Ca^{2+} ; Änderung der Lösungszusammensetzung führt zu leichter Untersättigung an NaCl	

Zusammenfassung und Ausblick

- erste Löslichkeitsdaten von C-S-H in NaCl-gesättigter Lösung
- Einbau von Na⁺ in die C-S-H-Schichtstruktur, abhängig von Ca/Si-Verhältnis
- vergleichende Modellrechnungen mit Mischphasenmodellen der Cemdata18 in THEREDA
- Mg²⁺ in Lösung führt zu quantitativer Umsetzung von C-S-H zu M-S-H

- mehr experimentelle Daten notwendig
 - Variation von Parametern: Temperatur (erste Exp. bei 80 °C), NaCl-Konzentration, Edukte (unterschiedliche Reaktivität)
 - stufenweise Erweiterung der Systeme (Mg²⁺, Al³⁺, ...) für besseres Verständnis bei realen Bedingungen
- Validierung THEREDA

Zusammenfassung und Ausblick

- erste Löslichkeitsdaten von C-S-H in NaCl-gesättigter Lösung
- Einbau von Na⁺ in die C-S-H-Schichtstruktur, abhängig von Ca/Si-Verhältnis
- vergleichende Modellrechnungen mit Mischphasenmodellen der Cemdata18 in THEREDA
- Mg²⁺ in Lösung führt zu quantitativer Umsetzung von C-S-H zu M-S-H

- mehr experimentelle Daten notwendig
 - Variation von Parametern: Temperatur (erste Exp. bei 80 °C), NaCl-Konzentration, Edukte (unterschiedliche Reaktivität)
 - stufenweise Erweiterung der Systeme (Mg²⁺, Al³⁺, ...) für besseres Verständnis bei realen Bedingungen
- Validierung THEREDA

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

2.5

G.D. Miron, B. Lothenbach, and D.A. Kulik: **Thermodynamic Modeling of cementitious systems: Cemdata18, CemGEMS, ongoing C-(A)-S-H model development, and integration with THEREDA**



G. Dan Miron¹, B. Lothenbach², Dmitrii A. Kulik³ :: ¹PSI :: ²EMPA (Switzerland)
**Thermodynamic Modeling of cementitious systems:
Cemdata18, CemGEMS, ongoing C-(A)-S-H model
development, and integration with THEREDA**

AKB-Workshop „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“

5-7 September 2023

364

Thermodynamic modeling

- Make prediction at conditions and over timescales that are not accessible to direct observation and laboratory experiments

accurate, robust

Thermodynamic models

relations between thermodynamic properties,

calculation of measurable properties

Equations of State
Aqueous activity model,
Solid solution model
...

robust

Modelling tool packages

chemical equilibrium speciation solver codes

Expert knowledge,
Conceptual model,
Chemical system

+

consistent, accurate, complete, traceable

Thermodynamic datasets

values of thermodynamic properties and model parameters

Properties of substances and reactions ($\log_{10}K_s$, ΔG_m° ...),
empirical parameters

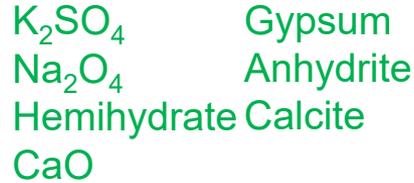
Example: Hydration

Portland cement

I Clinkers



II Other solids



III Water H_2O

Hydration kinetics

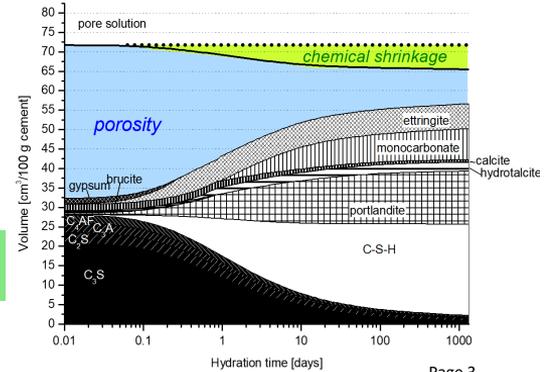
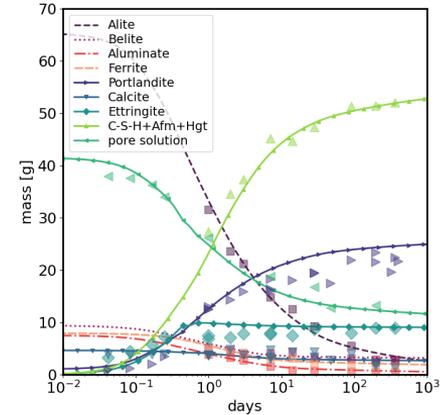
Thermodynamic modeling

Hydrated PC

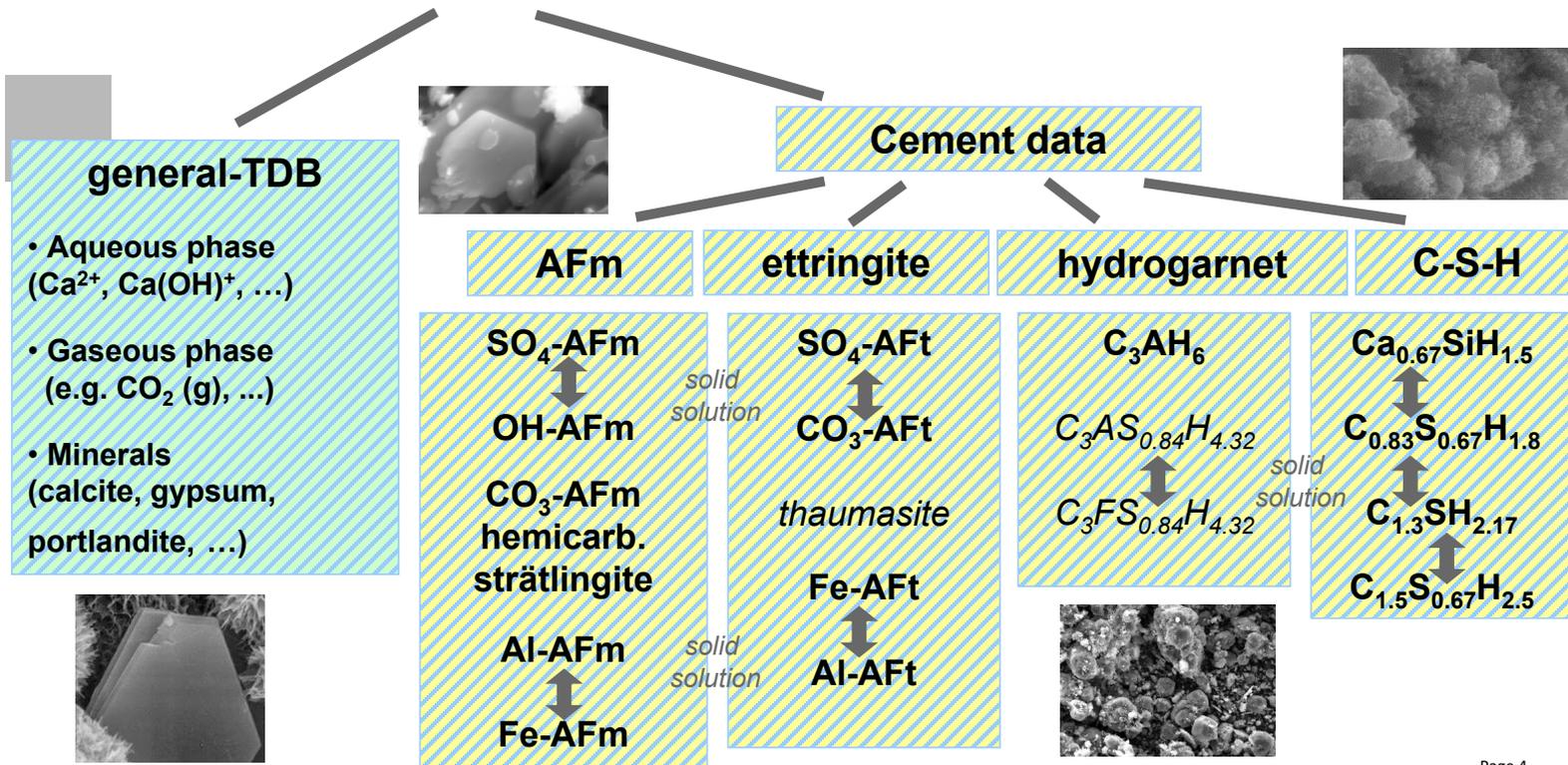


Hydrates precipitation

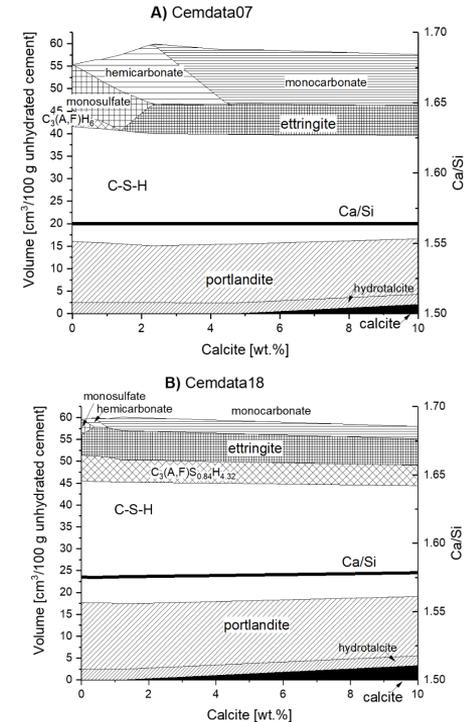
XRD Rietveld analysis



Thermodynamic data to model cement



- **Cemdata07** (published between 2006-2008), **Cemdata18** has undergone significant improvements
- Updates on data for **Al and Fe containing phases**
- **Solid solution models** for AFm, AFt, C-S-H, and M-S-H
- Subset data for **hydrated Mg-Ca phosphate cements**
- Subset data for **Ca-, K-, and Na-zeolites**
- Available **from GEMS, PHREEQC, GWB**
- Literature and in house experimental data on relevant cement phases / assemblages are used to extract solubility constants (**extended Debye Hückel activity model**)
- Using **PSI/Nagra database** as general database
- **Updates** consistent with **NEA cement and PSI TDB 2020** are planned



Thermodynamic data: gaps, scatter

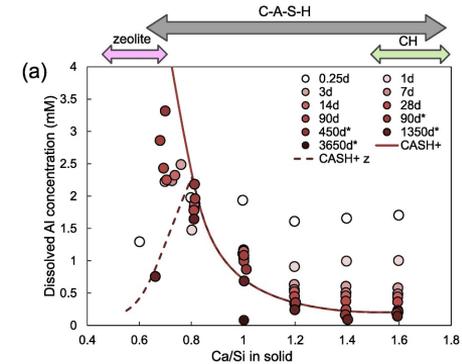
- Small differences in data -> other solids stable
small errors can lead to wrong results
- Gaps in database: cation/anions uptake in C-S-H, LDH phases

Kinetics: some phases are metastable, do not form in the timeframe considered, uptake kinetics

- C-S-H metastable (jennite, tobermorite, ...), hydrogarnet
- Quartz, dolomite, goethite, hematite, gibbsite, talc, thaumasite (only at low temp), ...
- Slow kinetics

Experiments: to retrieve accurate thermodynamic data, difficult systems

- Synthesis, characterization methods (XRD, TGA, spectroscopy, ...)
- Solubility, thermochemical



Phases relevant for interaction with brines

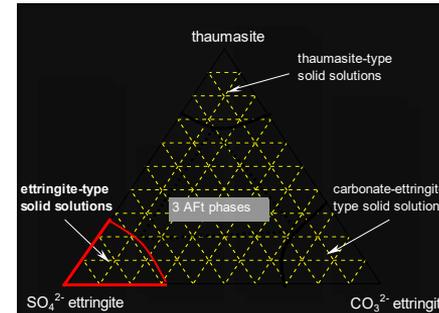
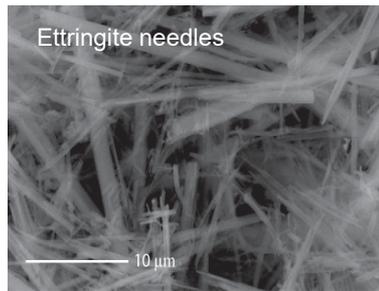
Besides **gypsum, anhydrite and soluble salts**:

Metals hydroxides: e.g., brucite (Mg^{2+} solution), iron oxihydroxides (corrosion)

Silicate hydrates: C-S-H, M-S-H, N-A-S-H, ... (Mg^{2+} , alkali activated soda materials)

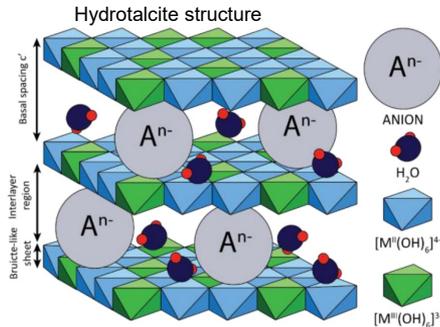
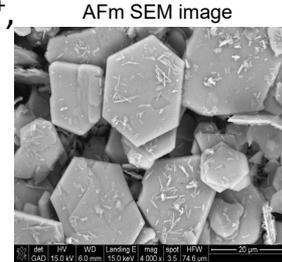
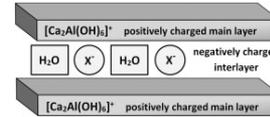
AFm (Ca-LDH): S-containing (monosulfate), Cl-containing (Friedel's salt, Kusel's salt)

- AFt: $[\text{Ca}_3(\text{Al,Fe})(\text{OH})_6 \cdot 12\text{H}_2\text{O}]_2 \cdot (\text{CO}_3, \text{SO}_4)^{2-} \cdot 3 \cdot \text{xH}_2\text{O}$ (ettringite)
 - Forms at early stage of hydration
 - **Sulfate attack** – reaction of CH, monosulfate, C-S-H with additional sulfate to form ettringite, gypsum, thaumasite (presence of carbonate)

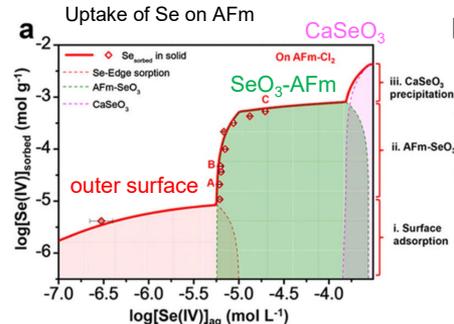


Layered double hydroxides (salt binding)

- Interactions: **Sorption, exchange and solid solution, phase precipitation**
- $[M^{2+}_{1-x}M^{3+}_x(OH)_2]_x + [A^{n-}_{x/n} \cdot mH_2O]^{x-}$, where M^{2+} can be Mg^{2+} , Mn^{2+} , Ca^{2+} , etc.; M^{3+} : Al^{3+} , Fe^{3+} , Cr^{3+} , etc.; and A^{n-} : NO_3^- , Cl^- , OH^- , CO_3^{2-} , SO_4^{2-} , etc.
- **AFm phases**: OH^- , Cl^- , CO_3^{2-} ;
– low Ca high Al:Si: **strätlingite**
- Mg:Al; **hydrotalcite** (-like) phases OH^- , Cl^- ;
- **Chlor-aluminate** phases: **Friedel's salt** and **Kuzel's salt**

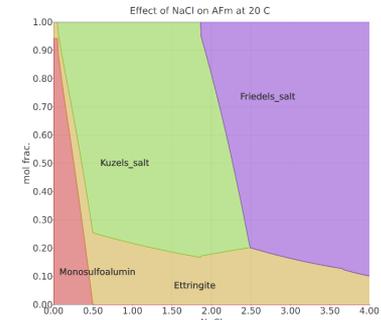


Dębek ea (2017)



Ma ea (2018); Nedyalkova ea (2022);

371



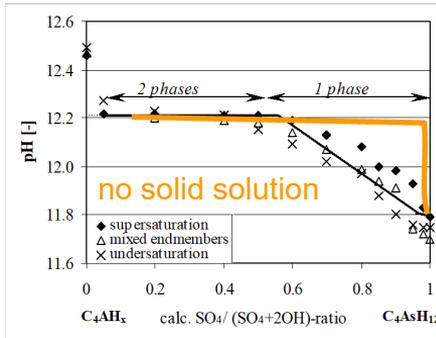
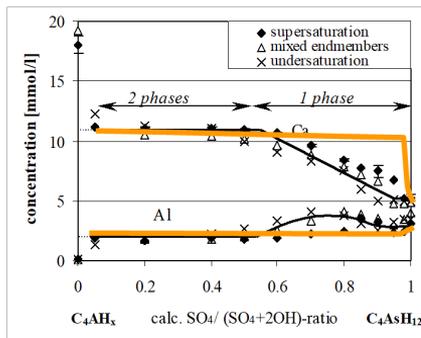
Page 8

Characteristics of solid solution:

- peak shift in XRD
- continuous change of concentrations

Effects of solid solution:

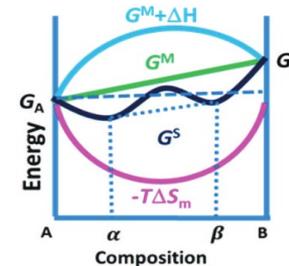
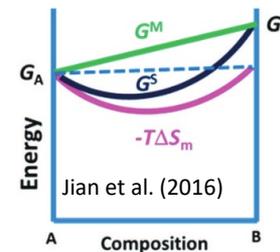
- stabilizes solids
- lowers aqueous concentrations



AfM – monosulfate (SO₄²⁻/OH⁻), CO₃²⁻ separate phase

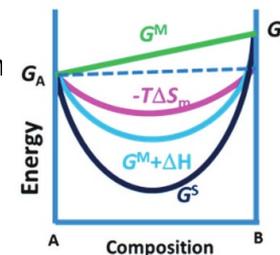
Ideal solid solutions

- Very similar
- Simple to model



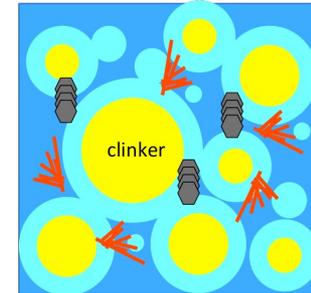
Non-ideal solid solutions

- Different interactions, function of composition
- Simple to Complex models



C-S-H: A “glue” keeping cement intact

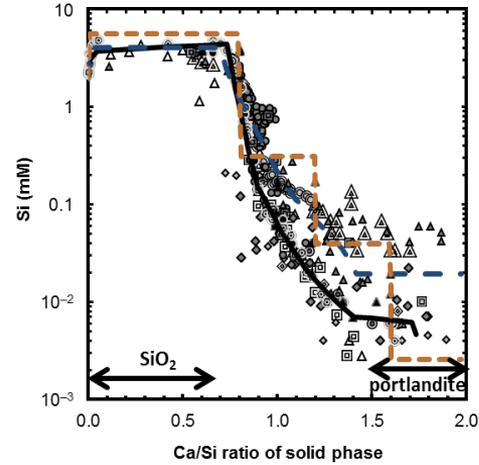
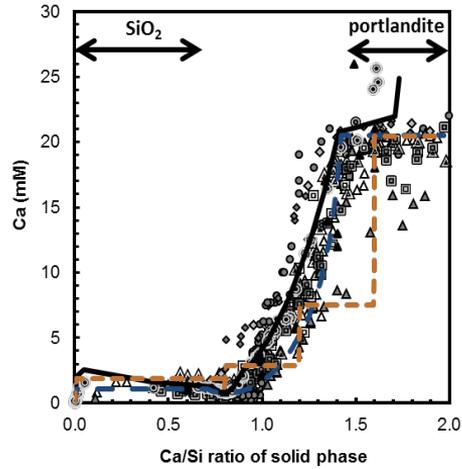
- ❑ Ubiquitous C-S-H phases of variable composition determine the most relevant properties and durability of hydrated cements and concretes and is a main sorbent cations and anions.
- ❑ **Early models difficult to calculate uptake isotherms of different elements, water content, density/volume and do not include structural features (Mean silicate Chain Length)**



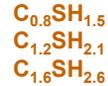
● C-S-H ● Portlandite ↗ Ettringite

CASH+ multi-site solid solution model

- ❑ capable of accurately describing C-S-H solubility, uptake of cations (Ca, Na, K, Al, Sr, Ba, Fe, ...), temperature dependence, water content, density/volume, and structural properties of C-S-H (mean silica chain length MCL)
- ❑ **Can be extended incrementally** and in consistency with PSI-Nagra and Cemdata TDBs.
- ❑ Application of CASH+ model **to moderately elevated temperatures** is possible.
- ❑ Properties of **some endmembers and IPs can be estimated** (similar cations and correlations).
- ❑ Can be used in GEM codes to simulate **equilibrium solid- and pore-water compositions** in cementitious materials.
- ❑ Can be discretized into many pseudo-compounds and **exported for PHREEQC and other codes.**



3 different discrete CSH



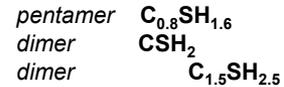
Blanc et al. (2010) CCR 40, 851-866

Solid solution



Kulik (2011) CCR 41, 477-495

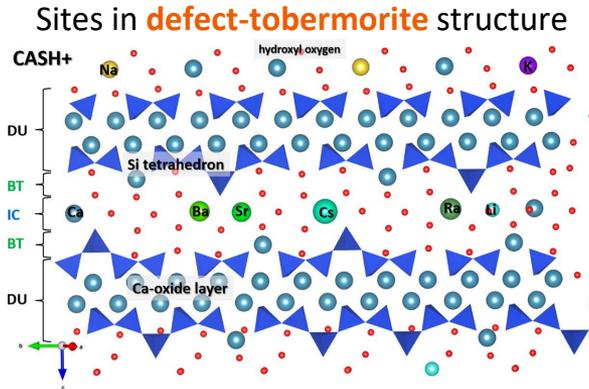
Surface reaction model



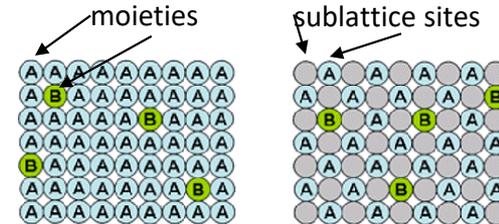
Haas, Nonat (2015) CCR 68, 124-138

CASH+ model: sublattice sites and moieties

Sites	DU (dimeric unit)	BT (bridging tetrahedral)	IC (interlayer cation)	IW (interlayer water)	
Site multiplicity / charge		1 / 0	1 / -	1 / +	1 / 0
Moieties (species)	$[\text{Ca}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_2]^0$	T	SiO ₂ OH ⁻ OH ⁻ CaOH ⁺ Al(OH) ₄ ⁻ ...	S v C A H ⁺ CaH(OH) ₂ ⁺ NaHOH ⁺ KHOH ⁺ CsHOH ⁺ SrH(OH) ₂ ⁺ AlH(OH) ₃ ⁺ ...	v C N K Cs Sr A H ₂ O Va h v



- All moieties in **BT sites** have **charge -1** and moieties in **IC sites** have **charge +1** → all **electroneutral end members**



From <http://www.mcc-sci.com>

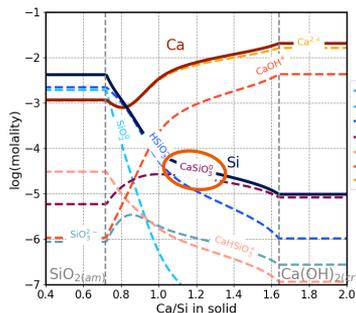
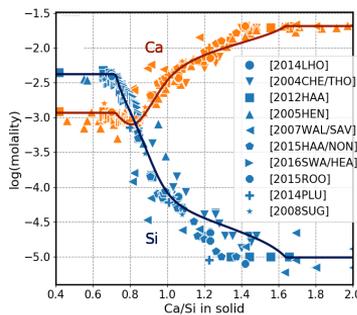
Kulik, D. A., Miron, G. D., & Lothenbach, B. (2022). *Cement and Concrete Research*, 151.

Miron, G. D., Kulik, D. A., Yan, Y., Tits, J., & Lothenbach, B. (2022). *Cement and Concrete Research*, 152.

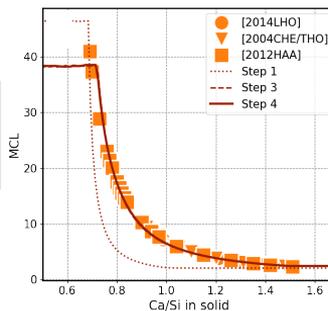
- Simultaneous fit of **endmember stability (G^0)** and **interaction parameters (IP)** against measured aqueous and solid phase composition

Sublattice non ideal CASH+ core model fit: **6 G^0 values + 4 IPs + G^0 of CaSiO_3^0**

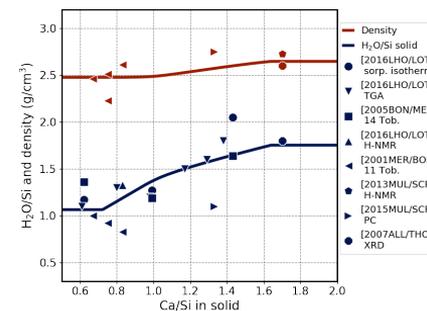
Solubility (in log10 scale)



Mean chain length



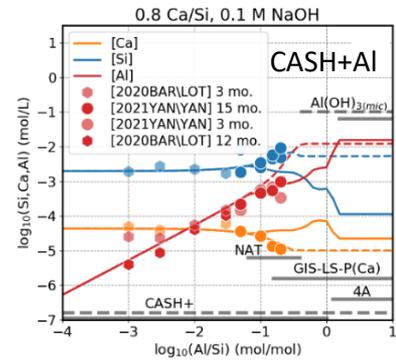
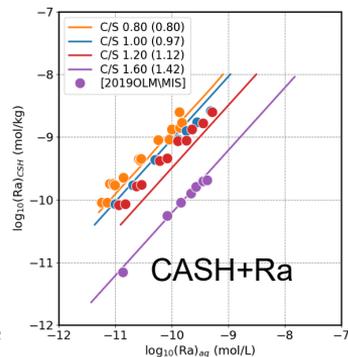
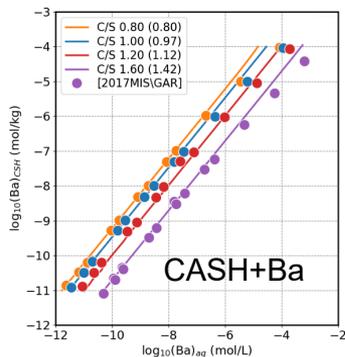
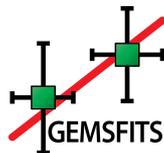
Density and Water content



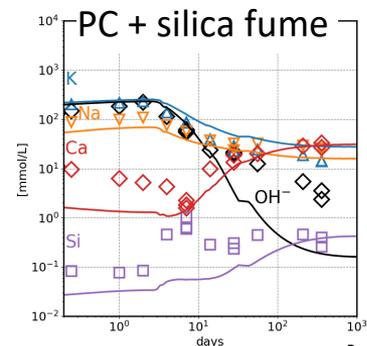
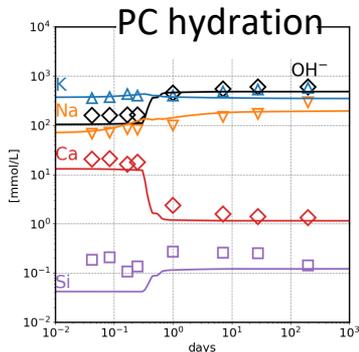
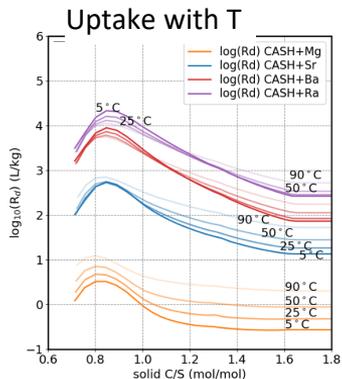
Kulik, D. A., Miron, G. D., Lothenbach B. (2022). A structurally-consistent CASH+ sublattice solid solution model. *Cement and Concrete Research*, 152.

CASH+ extension: alkali [earth] metals uptake

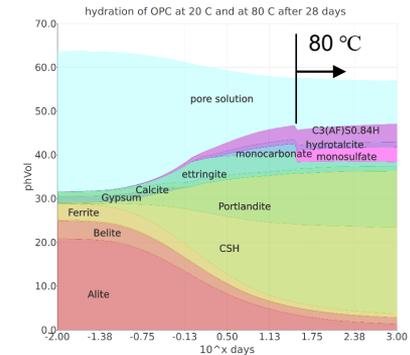
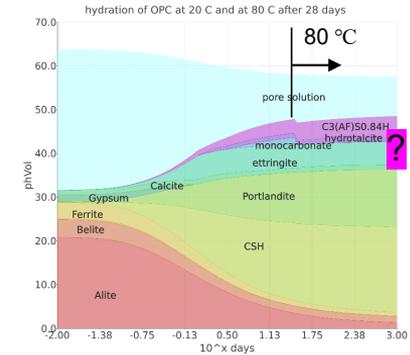
Model extensions optimization



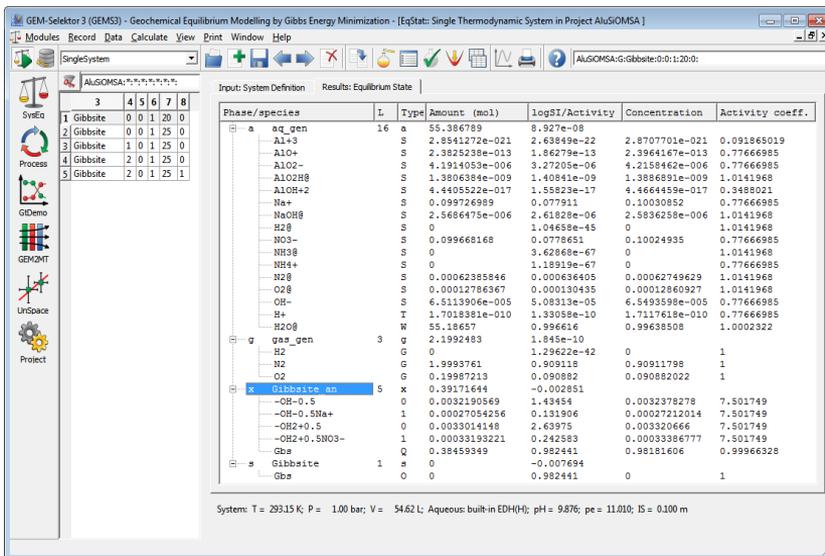
Model predictions calculations



- Eventually, the CASH+ model will grow into its own **TDB of standard properties for dozens of endmembers with many interaction parameters**
- **C-S-H was shown to retain significant anions (SO_4^{2-} , Cl^- , ...)**
- Can have an impact on the calculated solution composition and equilibrium phase assemblages
- A mechanistic **surface complexation model for C-S-H** is urgently needed, to be combined with CASH+ model
- Difficulties in **distinguishing structural incorporation from fine-scale intermixing and adsorption**



- A general framework for Chemical Thermodynamic Modelling of Complex Systems that may involve many (non)ideal solutions, gas mixture, metastability and kinetics



Input: System Definition Results: Equilibrium State

Phase/species	I	Type	Amount (mol)	logSI/Activity	Concentration	Activity coeff.
aq_gen	16	a	55.396789	8.927e-08		
Al+3	S	2.8541272e-021	2.63849e-22	2.8707701e-021	0.091865019	
AlO+	S	2.3825238e-013	1.86279e-13	2.3964167e-013	0.77666985	
AlO2-	S	4.1914053e-006	3.27205e-06	4.2158462e-006	0.77666985	
AlO2H8	S	1.3806304e-009	1.40341e-09	1.38368931e-009	1.0141968	
AlOH+2	S	4.4405522e-017	1.58823e-17	4.4664459e-017	0.3488021	
Na+	S	0.099726989	0.077911	0.10030852	0.77666985	
NaOH8	S	2.5686475e-006	2.61828e-06	2.5836258e-006	1.0141968	
H2O	S	0	1.04658e-45	0	1.0141968	
NO3-	S	0.0996681e8	0.0778651	0.10024935	0.77666985	
NH38	S	0	3.62868e-67	0	1.0141968	
NH4+	S	0	1.18919e-67	0	0.77666985	
H2	S	0.00062385846	0.000636405	0.00062749629	1.0141968	
O2	S	0.00012786267	0.000130435	0.00012869927	1.0141968	
OH-	S	6.5113906e-005	5.08313e-05	6.5493598e-005	0.77666985	
H+	T	1.7018381e-010	1.33058e-10	1.7117618e-010	0.77666985	
H2O8	W	55.18657	0.996616	0.99638508	1.0002322	
gas_gen	3	g	2.1992483	1.845e-10		
H2	G	1.9993761	0.909118	0.90911798	1	
O2	G	0.19987213	0.090882	0.090882022	1	
GEM-Selektor an	S	x	0.39571644	-0.002851		
-OH-0.5	0	0.0032190569	1.45848	0.0032378278	7.501749	
-OH-0.5Na+	1	0.00027054256	0.131906	0.00027212014	7.501749	
-OH2+0.5	0	0.0033014148	2.63975	0.003320666	7.501749	
-OH2+0.5NO3-	1	0.00033139221	0.242583	0.00033386777	7.501749	
Gba	Q	0.39459349	0.992441	0.98181806	0.99866328	
Gibbsite	1	a	0	0.007694		
Gba	0	0	0.982441	0	1	

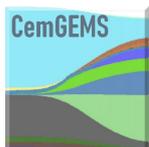
System: T = 293.15 K; P = 1.00 bar; V = 54.62 L; Aqueous: built-in EDH(H); pH = 9.876; pe = 11.010; IS = 0.100 m

Calculation of chemical equilibria in 'rich' chemical systems with:

- aqueous electrolyte;
- non-ideal gaseous fluids;
- non-ideal solid solutions;
- non-ideal (ionic) melts;
- adsorption, ion exchange;
- Many pure phases (s, l);
- metastable species / phases, kinetic restrictions

<https://gems.web.psi.ch/> >11'000 downloads, >1'100 active users, >1'500 publications

- **CemGEMS is a web application** for assisting cement chemists and engineers with easy-to-use thermodynamic models of hydration, blending and degradation of cementitious materials in research and practice
- **Developed since 2018 and maintained in Switzerland at CONGINEER Ltd.** in collaboration with leading scientists from Empa, PSI, EPFL, ETHZ and industry experts.



CEMGEMS | CEMENT HYDRATION dkulik Login

Welcome! With **Nanocem** CemGEMS web app, you can

- ✓ Choose what you need from a score of real-data cement recipe templates covering relevant application areas
- ✓ Select a template for Portland, blended or advanced cement, given in amounts of clinker minerals or as XRF chemical data
- ✓ Compute partial-equilibrium hydrated phase assemblage and pore water composition using **GEMS** with **Cemdata16** TDB
- ✓ Compare initial and final volumes, masses, densities for phases in equilibrated and residual parts of cement recipe
- ✓ Adjust mineralogical or chemical composition of cement recipe, its materials (Cement, SCM, Salts), and their constituents
- ✓ Set or change water-binder (w/b) ratio, reaction extent (degree), temperature, pressure, and other input parameters
- ✓ Simulate various (templated) processes of cement hydration, blending, and degradation, presented as plots and tables
- ✓ Follow the process of cement hydration as function of time using built-in 4PL or modified Parrot & Killoh kinetic model
- ✓ Evaluate isothermal heat effects and adiabatic temperature rise as function of time in the process of cement hydration
- ✓ Store your recipes, processes and results in your user profile, retrievable in web browsers running on multiple devices
- ✓ Benefit from the expertise of renowned cement chemists that maintain recipe and process templates, or contribute your own

Learn more in CemGEMS info/tutorial pages at cemgems.org and our [YouTube channel](#)

▶ status: OK | localdb: cemgems_app | action: delete(currentUser)

Nanocem Consortium Version 0.7.0 Copyright © 2018-2023 CONGINEER Ltd.

Access options

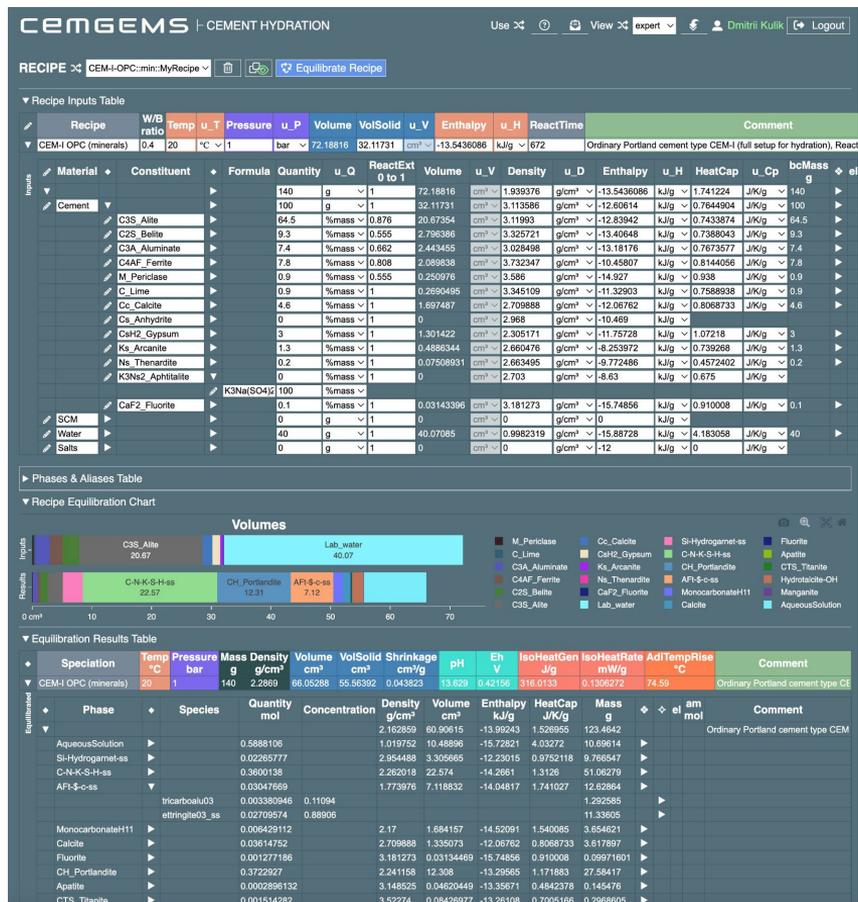
- ▶ Try in a demo session
- ▶ Register as a new user
- ▶ Forgot your password?

<https://gemgems.app>
– web app

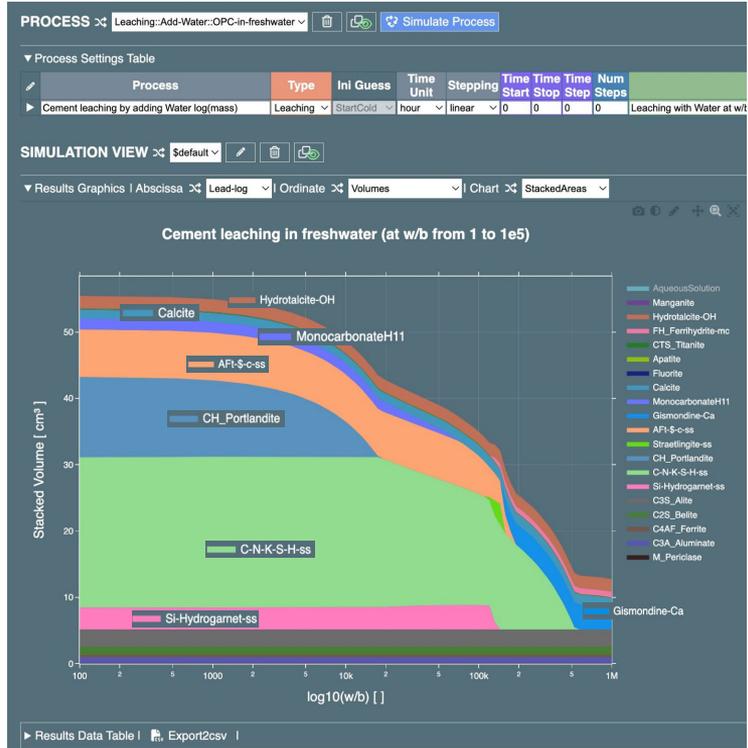
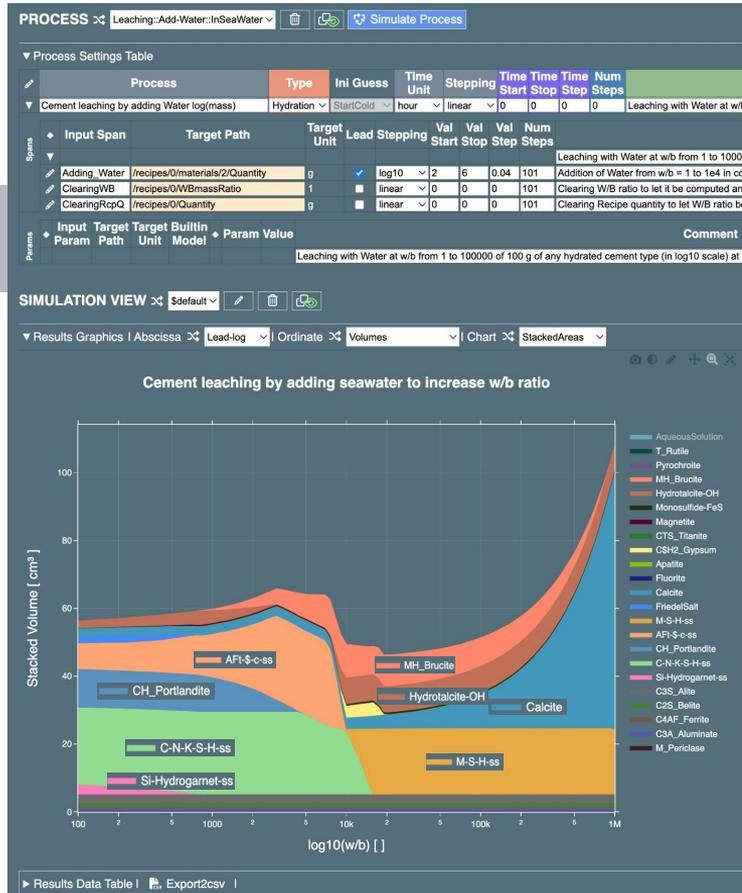
<https://cemgems.org>
– introduction and tutorials

To date, >700
registered users
worldwide

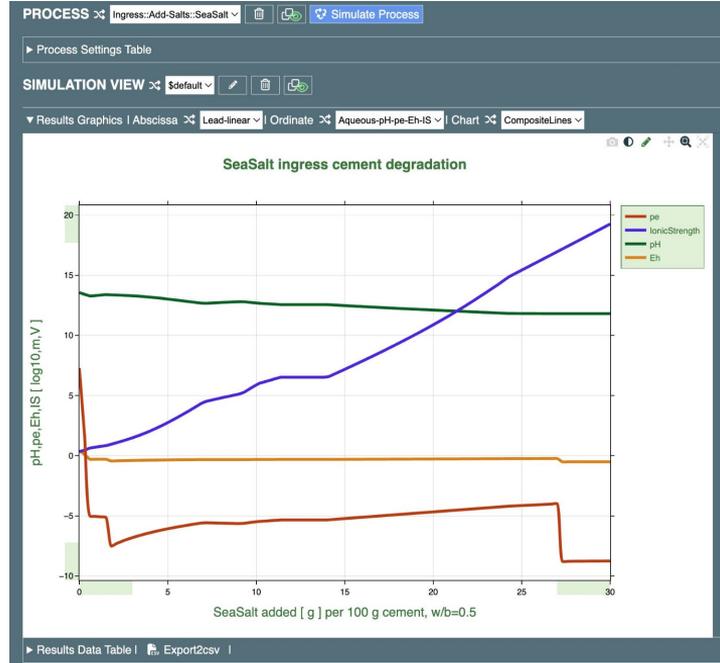
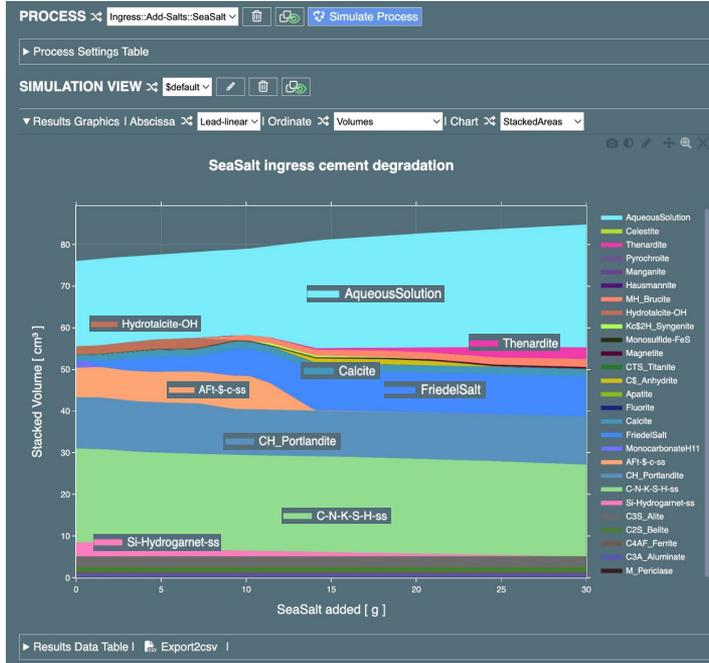
- Well-worked **recipe templates** provided for 10 types of cement and 6 types of processes
- Recipe- and process documents** can be cloned & modified by expanding into tree-like tables
- Results of **partial equilibration** are given as tables and diagrams
- Results of **process simulations** (e.g. leaching, hydration, salt ingress) - as 2-D plots and CSV tables (to download)



Leaching in sea-, river-water



Simulation of ingress (salt attacks, carbonation)





Requirements:

- **Solids**
 - **Accurate data for hydrates**, new possible phases, **solid solution models** for hydrates and new phases (interaction with salts, uptake cations and anions)
 - **Accurate data for soluble salts** that can precipitate from concentrated solutions
- **Aqueous**
 - **Activity models** to account for non ideal behavior of highly concentrated multicomponent solutions (Pitzer)

- **Internally consistent thermodynamic reference database** for geochemical modeling of aqueous electrolyte solutions up to high concentrations
- Based on **Pitzer formalism**, optimized for solubility calculations in high-saline media.
- **Consistent with PSI TDB, recently updated with cement phases** from cemdata
- Needs to be updated concerning the relevant interactions of Si and Al species

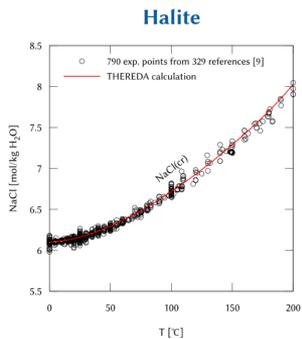


Figure 2: Temperature-dependent solubility of halite in the range of $T = 0\text{--}200\text{ }^{\circ}\text{C}$.

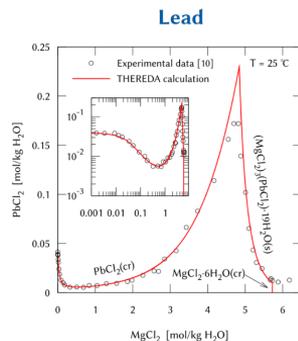


Figure 3: Solubility diagram of the ternary system $\text{PbCl}_2\text{-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$ at $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$.

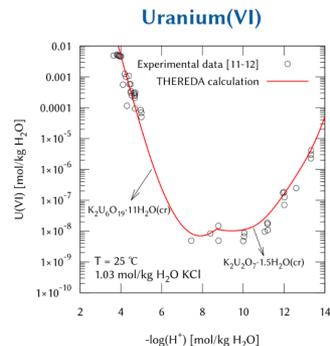


Figure 4: Solubility of $\text{K}_2\text{U}_2\text{O}_7 \cdot 11\text{H}_2\text{O}(\text{cr})$ and $\text{K}_2\text{U}_2\text{O}_7 \cdot 1.5\text{H}_2\text{O}(\text{cr})$ in KCl solution at $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$.

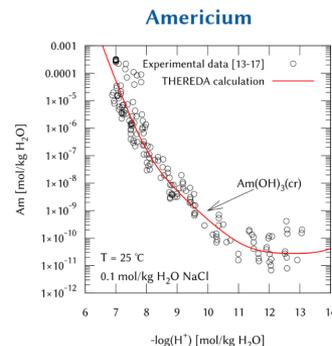


Figure 5: Solubility of $\text{Am}(\text{OH})_3(\text{cr})$ in NaCl solution at $T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Cemdata + Thereda =

Collecting, evaluating, and selecting the experimental data

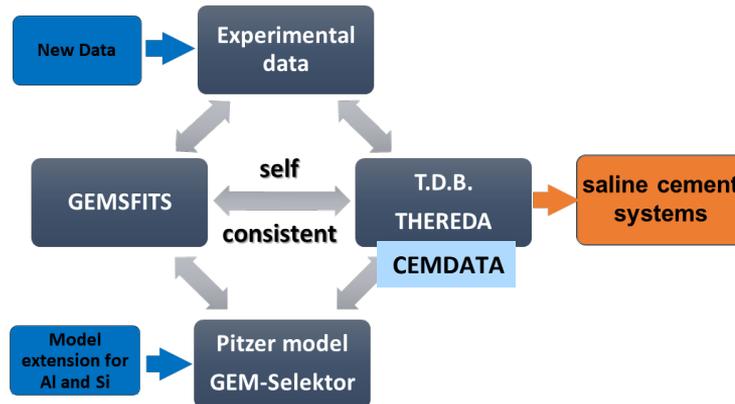
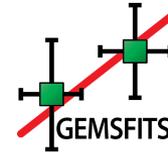
- System: Al-Si-Ca-Mg-Na-K-Cl-SO₂-CO₂-H₂O

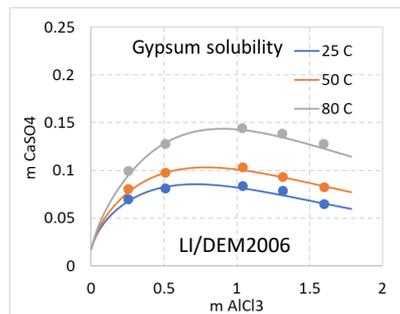
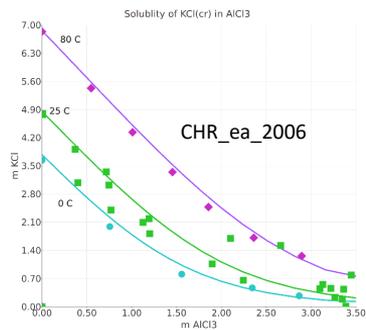
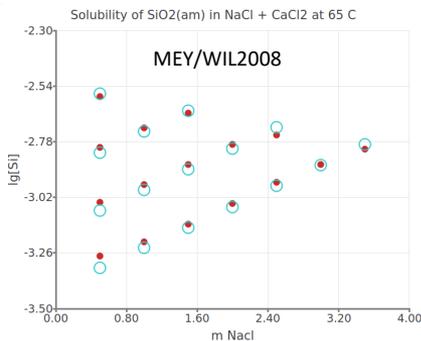
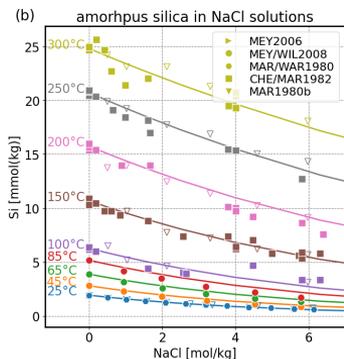
System setup (a) and parameter **optimization (b)**

- Basis the oceanic salt system of THEREDA
- Cement hydrates from cemdata

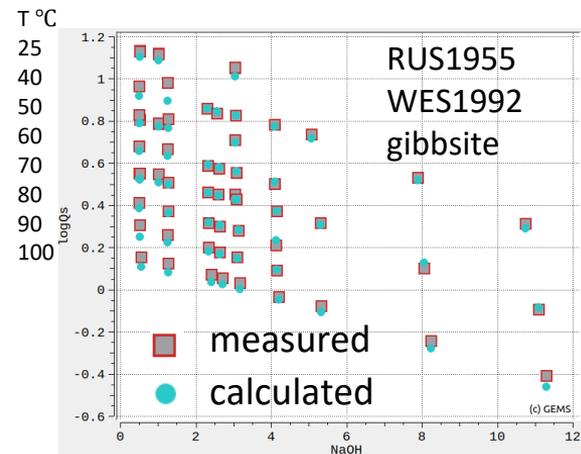
Validation against independent data (cement pore water composition, other solubility experiments)

THEREDA #10, BGE

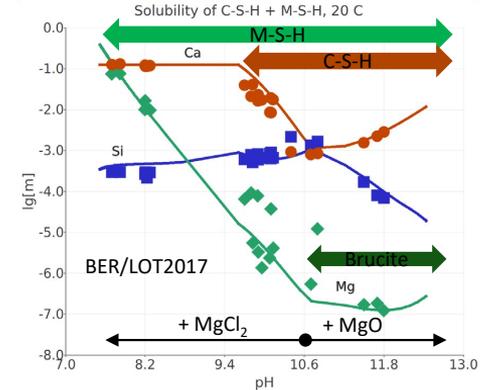
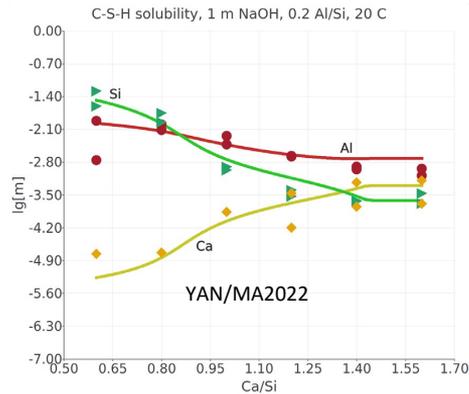
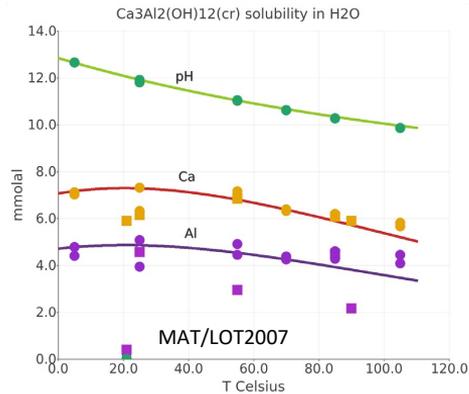




- Relevant polythermal IPs for Si and Al species with the oceanic salts were evaluated



- Predictions using updated Pitzer (Si, Al) parameters, thereda+cemdata, and CASH+ solid solution model



- Additional checks are needed in highly saline systems, limitations to low 0.01 m Si, Al concentration due to the formation of polymeric species
- Database always evolving when new measurements, models become available

- A lot of data is available (e.g., Cemdata, THEREDA), **more experiments are need for possible relevant new phases**, LDH as function of composition and temperature
- **Experimental data to evaluate the system for cement+brine** (C-S-H, M-S-H, AFm interaction with NaCl, KCl, Na₂SO₄, K₂SO₄, CaCl₂, MgCl₂) (e.g., Häusler ea. 2023)
- **Integration of Pitzer data from THEREDA (salt system) with cement hydrates from cemdata** with improved interaction parameter set (many codes are at present restricted to model cement systems to relatively low IS < 1-2)
- **Development and usage of CemGEMS functionality**, recipe- and process templates, tailored for saline systems (**funding required based on interest**)
- **A generic surface complexation model for Ca²⁺ ions and anions (e.g., Cl⁻, SO₄²⁻) on C-S-H surfaces** can be developed and coupled in GEMS with the CASH+ solid solution model.

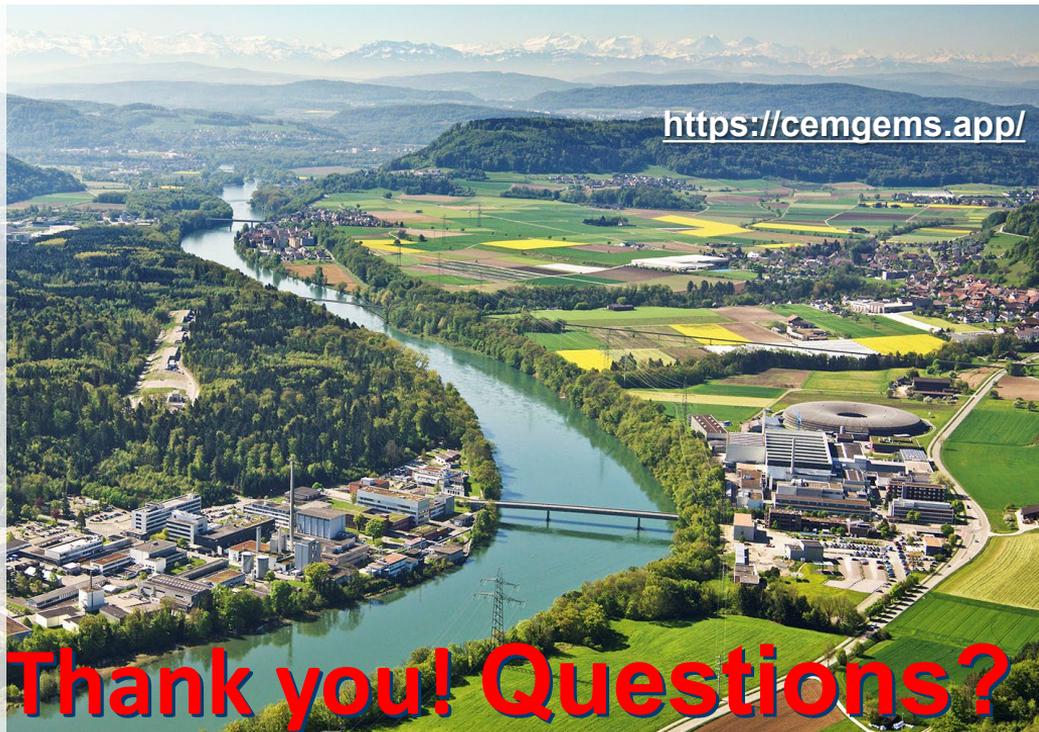
Acknowledgments:

Tres Thoenen,
Helge Moog,
Laurin Wissmeier
GEMS, PSINagra and
Thereda colleagues

nagra



BUNDESGESELLSCHAFT
FÜR ENDLAGERUNG



<https://cemgems.app/>

Thank you! Questions?

OPC ingress NaCl-NaHCO₃

RECIPE > CEM-I-OPC:min:NaHCO3-NaCl-salt Equilibrate Recipe

Recipe Inputs Table

Recipe	W/B ratio	Temp	u_T	Pressure	u_P	Volume	VolSolid	u_V	Enthalpy	u_H	ReactTime	Comment
CEM-I-OPC (minerals)	0.5	20	°C	1	bar	82.20587	32.11731	cm ³	-13.2645765	kJ/g	672	Ordinary Portland cement type CEM-I (full setup for hydration), ReactExtent values given for 28 days of hydr

Material	Constituent	Formula	Quantity	u_Q	ReactExt	Volume	u_V	Density	u_D	Enthalpy	u_H	HeatCap	u_Cp	bcMass	g	el	ma	mol	ma	g	Comment
			170	g	1	82.20587	cm ³	2.067979	g/cm ³	-13.2645765	kJ/g	1.7481793	J/Kg	170							Ordinary Portland cement type CEM-I
			100	g	1	32.11731	cm ³	3.113586	g/cm ³	-12.60614	kJ/g	0.7644904	J/Kg	100							Portland cement via mineral composi
			0	g	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Supplementary cementitious materials
			50	g	1	50.08856	cm ³	0.9982319	g/cm ³	-15.88728	kJ/g	4.183058	J/Kg	50							Water (to mix with cement for hydratio
			20	g	1	0	cm ³	0	g/cm ³	-10	kJ/g	0.5794274	J/Kg	20							CO ₂ , sea salt and other salts for mod
			0	%mass	1	0	cm ³	1.358698	g/cm ³	-9.431626	kJ/g	5.794274	J/Kg	0							Carbon dioxide (for carbonation)
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	-10	kJ/g	0	J/Kg	0							Normative sea salt (35 g/kgsw)
			50	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	10							Sodium chloride (for chloride attack)
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Sodium Sulfate (sulfate attack)
			50	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	10							Sodium Carbonate (attack)
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Potassium chloride (for chloride attack)
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Potassium Sulfate (for sulfate attack)
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Potassium Carbonate (attack)
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Lithium chloride (for chloride attack)
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Lithium Sulfate (sulfate attack)
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Lithium Carbonate (attack)
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Magnesium chloride (for magnesium a
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Magnesium Sulfate (magnesium-sulfa
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Boric acid
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Sulfuric acid
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Hydrochloric acid
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Hydrofluoric acid
			0	%mass	1	0	cm ³	0	g/cm ³	0	kJ/g	0	J/Kg	0							Nitric acid

Phases & Aliases Table

Recipe Equilibration Chart

Equilibration Results Table

Speciation	Temp	Pressure	Mass	Density	Volume	VolSolid	Shrinkage	pH	EH	IsoHsatGen	IsoHeatRate	AdTempRise	Comment	
CEM-I-OPC (minerals)	20	1	bar	170	2.2426	83.38269	55.39736	-0.0069225	13.562	0.43294	163.8219	0.06771734	64.029	Ordinary Portland cement type CEM-I (full setup for hydration), ReactExtent

OPC ingress NaCl- NaHCO₃



2.6

I. Paschke, D. Freyer: **Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil 1 -Baustoffrezepturtypen und deren Eigenschaften**

TUBAF
Die Ressortuniversität
Seit 1785

Magnesiabaustoff - Stand von W&T
Teil 1
Baustoffrezepturtypen und deren Eigenschaften

Iris Paschke, Daniela Freyer
TU Bergakademie Freiberg, Institut für Anorganische Chemie, Salz- & Mineralchemie, TU Bergakademie Freiberg

Workshop „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“, 05.-07.09.2023, Braunschweig

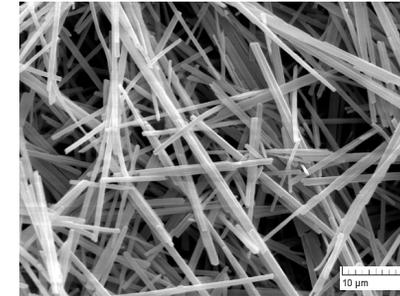
393

Magnesiabaustoff

MgO + konz. MgCl₂-Salzlösung =



Bindemittelphase(n):
 basische Mg-Chlorid-Hydrate
 $x \text{Mg(OH)}_2 \cdot y \text{MgCl}_2 \cdot z \text{H}_2\text{O}$
x-y-z-Phase (Sorel-Phase)
3-1-8- bzw. 5-1-8-Phase



+ Zuschläge



Sand / Kies



Quarzmehl



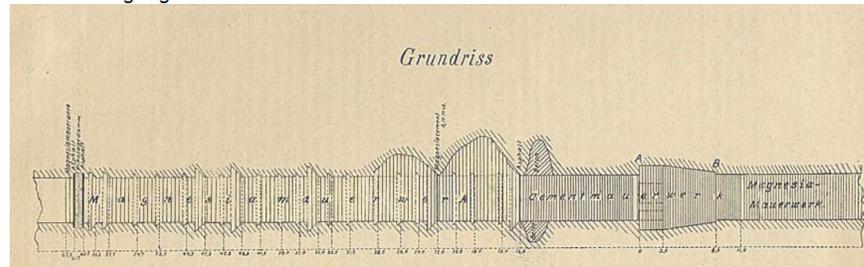
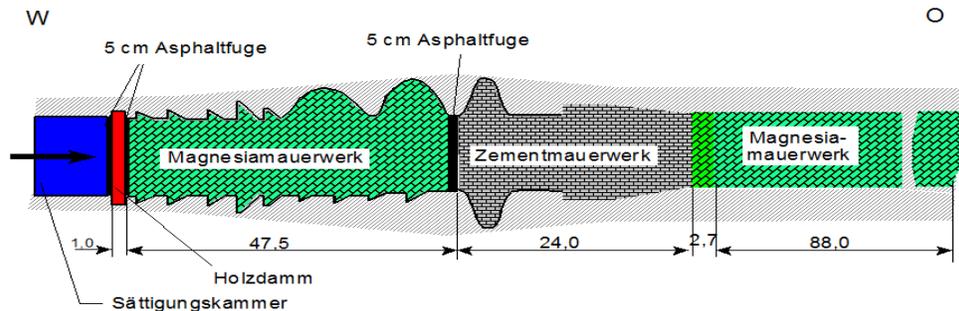
Salzgrus

Sorel, S., Sur un nouveau ciment magnésien, Hebd . Seances Acad. Sci . (1867) 65, 102 104.

Erste Anwendung

1898 ehemaliges Kaliwerk Leopoldshall

- in Steinsalzstrecke gegenüber 3,3 MPa Laugendruck errichtet
- 162m Damm aus Ziegelsteinen- und Magnesiaazementmörtel
- sorgfältig mit dem Gebirge verzahnt



Am 11. März 1900 hatten die Wasser das Niveau des Querschlages erreicht und sind seitdem noch 277,5 m gestiegen. Trotz dieses hohen Wasserdruckes, der bei dem spez. Gew. des stark salzhaltigen Wassers von 1,2 rd. 33 Atm. beträgt, erweist sich der Damm bis heute als vollkommen dicht.

Wasserdichte Verdämmung im Steinsalzgebirge. Glückauf 38 (1902) 14, S. 307 – 309

Entwicklung von W&T

heute

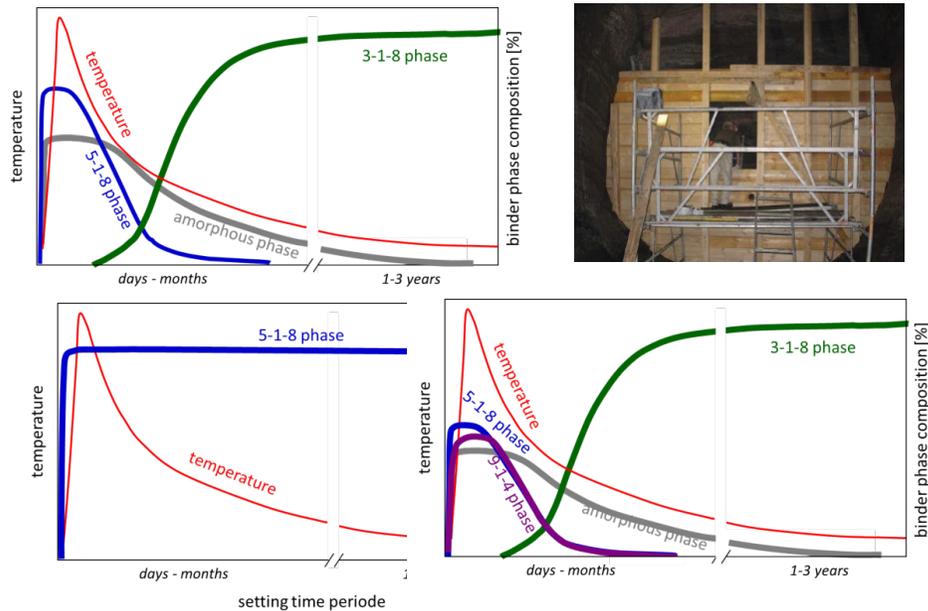
1898

1. Anwendung

... strukturierte Grundlagenforschung vor dem Hintergrund der Anwendung/-sfragestellung

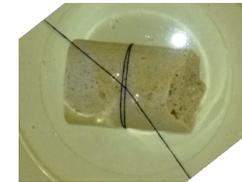
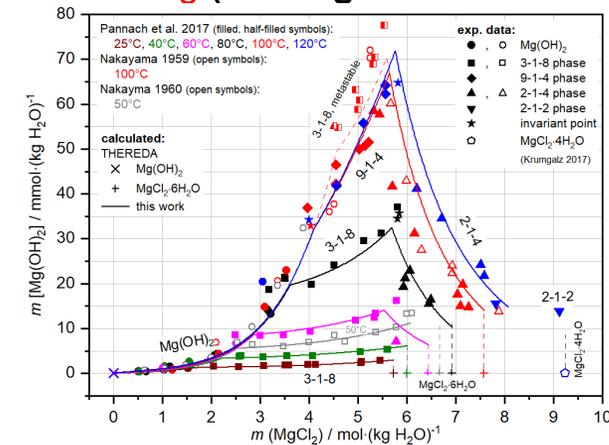


Phasenbildung während des Abbindens und Erhärtens des Magnesiabaustoff (**kinetisch kontrolliert**).



Phasenbildung und -stabilität unter **Gleichgewichtsbedingungen** im Grundsystem Mg^{2+} , Cl^- , OH^- - H_2O bei definierten Temperaturen (bis ca. 2010 nahezu keine Daten)

Thermodynamisch stabile Phase im Kontakt mit Lösung (Lösungszusammensetzungen!)



Freyer D. et al, Solid-liquid equilibria of Sorel phases and Mg(OH)_2 in the system $\text{Na-Mg-Cl-OH-H}_2\text{O}$, Part II: Pitzer Modeling, *Front. Nucl. Eng.* (2023) – accepted.

4

Iris Paschke

Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil 1 - Baustoffrezepturtypen und deren Eigenschaften



Stand von W&T – Forschungsprojekte, beteiligte Institutionen & Förderung



TU Bergakademie Freiberg
Institut für Anorganische Chemie
Institut für Bergbau und Spezialtiefbau

Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Bundesministerium
für Wirtschaft
und Energie

Bundesministerium
für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit
und Verbraucherschutz

INSTITUT FÜR
GEBIRGSMECHANIK
GMBH

PTKA
Projekträger Karlsruhe
Karlsruher Institut für Technologie

BUNDESGESELLSCHAFT
FÜR ENDLAGERUNG

Bundesamt für Strahlenschutz

BGE TEC
BGE TECHNOLOGY GmbH

IBeWa – Ingenieurpartnerschaft für Bergbau,
Wasser und Deponietechnik

GSES
Glückauf Sondershausen
Entwicklungs- und Sicherungsgesellschaft mbH

Grube
Teutschenthal

Materialforschungs- und -prüfanstalt Weimar

SCHACHTBAU
NORDHAUSEN

TS BAU
JENA

Bundesanstalt für
Materialforschung
und -prüfung

Competence
Center
for Material
Moisture

HELMHOLTZ
ZENTRUM DRESDEN
ROSSENDORF

Geotechnik und Bergbau

SALT TECHNOLOGIES

5 Iris Paschke
Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil 1 - Baustoffrezepturtypen und deren Eigenschaften



Rezepturtypen



MgO
konz. MgCl₂-
Salzlösung

Molverhältnis
MgO : MgCl₂ : H₂O

3 : 1 : ~ 11

3...5 : 1 : ~ 11

5 : 1 : ~ 11

< 5 : 1 : ~ 11

⇒ erwartete Bindemittel-
phase(n) nach dem
Abbindeprozess:

3-1-8

3-1-8, 5-1-8

5-1-8

5-1-8, MgO

Rezepturtyp:

„3-1-8“

„5-1-8“

Rezepturtypen

Zusammensetzungen derzeitiger eingesetzter Rezepturen

Rezepturtyp „3-1-8“

Rezepturtyp „5-1-8“

A1

Asse

10,8-11,8 Ma% MgO-LW
 24-26 Ma% MgCl₂-Lsg.
 62-65 Ma% Salzgrus

DBM2 (B2)

Bleicherode

10,5 Ma% MgO-LW
 20,8 Ma% MgCl₂-Lsg.
 34,3 Ma% Sand
 29,5 Ma% Anhydrit
 4,5 Ma% Microsilica
 (amorphes SiO₂)

C3

Sondershausen
 Teutschenthal

7 Ma% MgO-LW
 16 Ma% MgCl₂-Lsg.
 65 Ma% Sand/Kies, 0-8 mm
 21 Ma% Quarzmehl
 (kristallines SiO₂)

D4 (MB10)

Teutschenthal

<i>Ortbeton</i>	<i>Spritzbeton</i>	
18,2 Ma%	15,6 Ma%	MgO-LW
18,2 Ma%	11,5 Ma%	MgCl ₂ -Lsg.
63,6 Ma%	72,9 Ma%	Sand/Kies, 0-8 mm

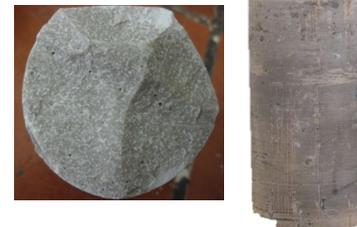
zugehörige
FuE-Projekte

- ESA
- STROEFUN III
(A1-Variante)

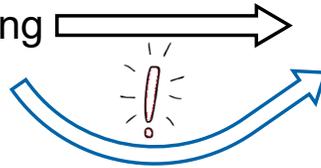
- FKZ 02C1214
 Verbundprojekt: Weiterentwicklung von
 Magnesiabindern von der Strömungs-barriere
 hin zu einem Verschlusselement im Salinar -
 Hauptprojekt

- MgO-Project
- ELSA II
- MgO-C3

- CARLA II / MgO-SEAL
- MgO-S³
- MgO-Projekt



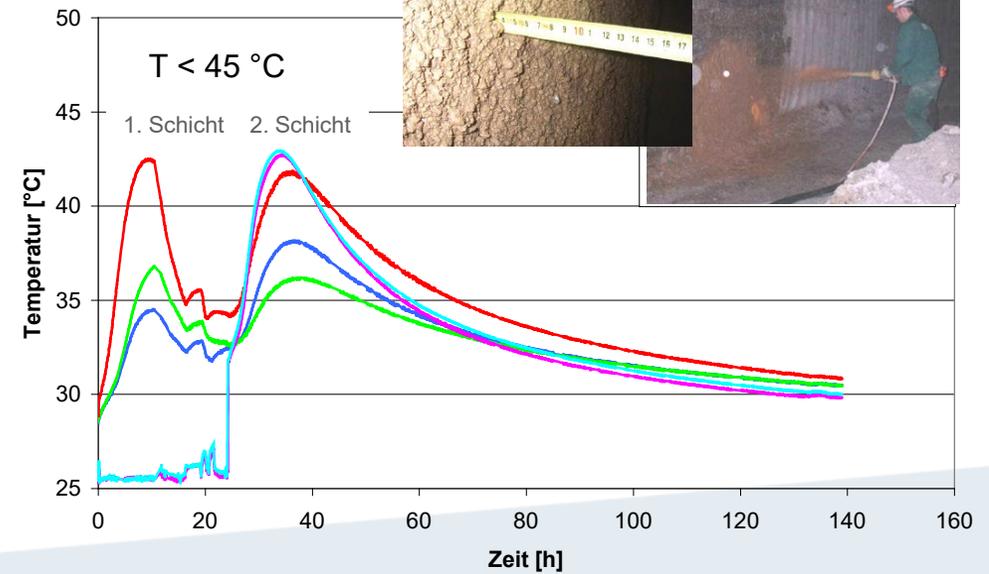
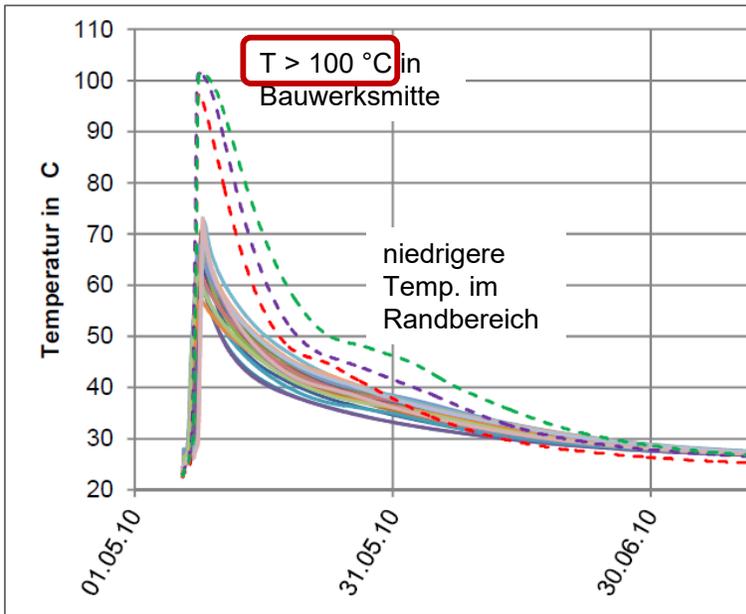
Temperaturentwicklung



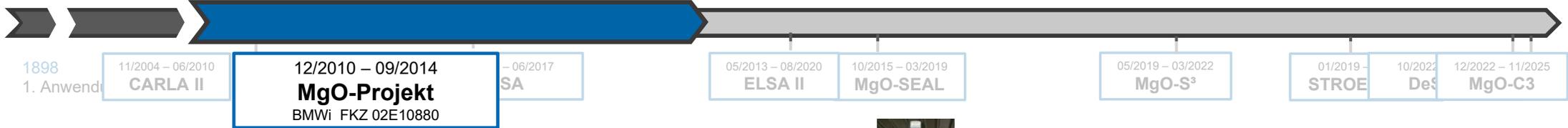
Ortbeton

Spritzbeton

Abbindereaktion über Hochtemperaturphasen möglich

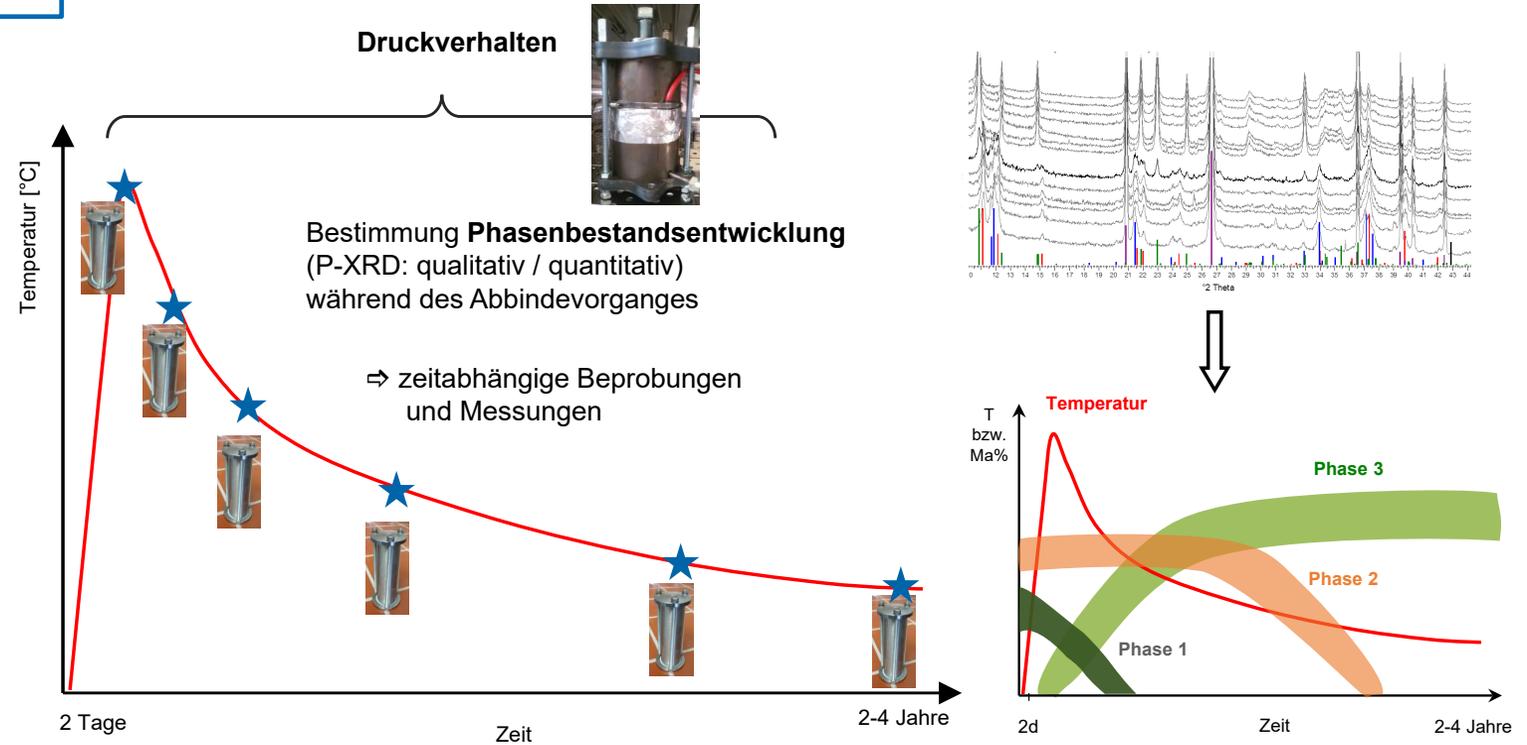


Stand von W&T – relevante Forschungsprojekte



Entwicklung eines grundlegenden Verständnisses zur Abbindereaktion

- Rezepturklassifizierung in 3-1-8- bzw. 5-1-8-Typ

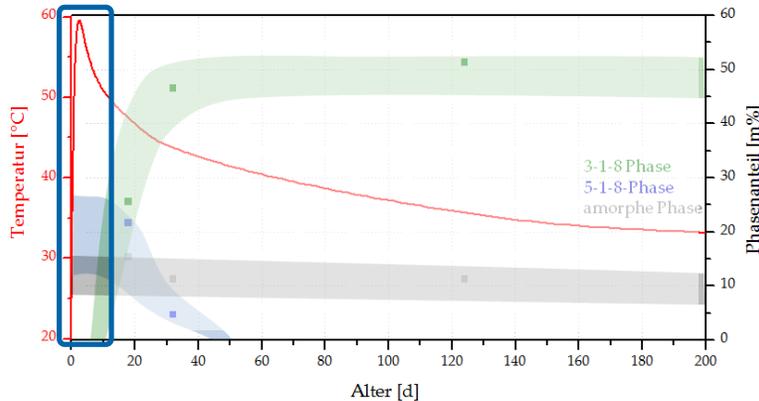
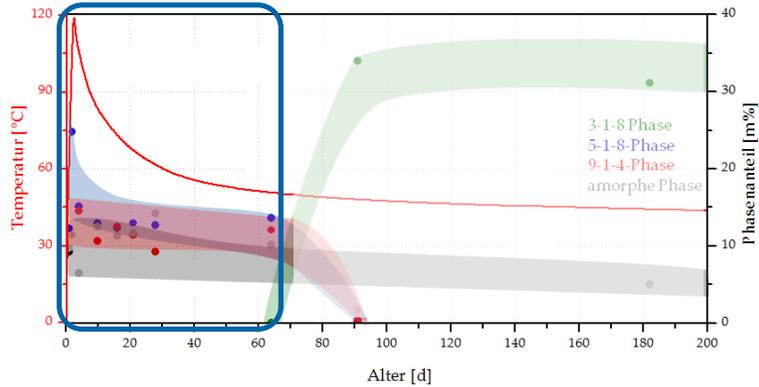


Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Baustoffs, BMWi FKZ 02E10880

3-1-8-Rezepturtyp (A1, B2, C3)

Phasenbestandsentwicklung

Molverhältnis im Rezepturansatz
 $MgO : MgCl_2 : H_2O$
 $\sim 3 : 1 : 11$

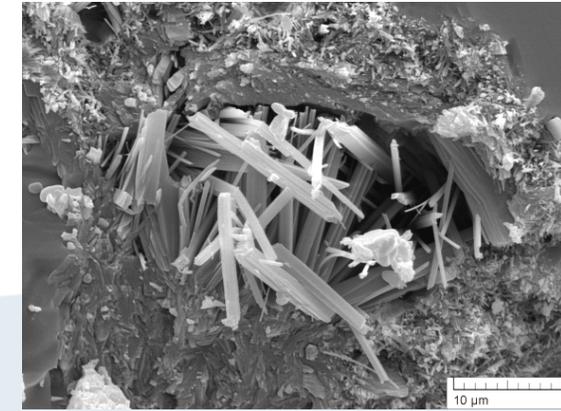
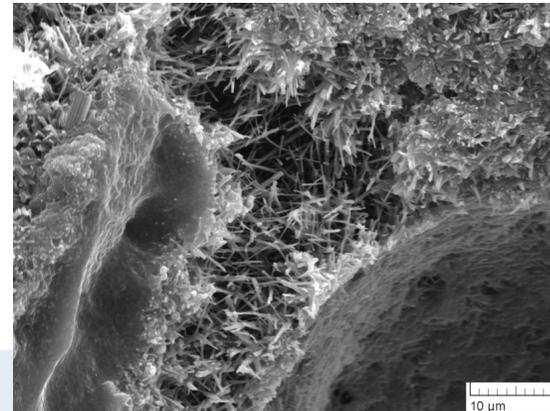


zweistufiger Abbindeprozess:

primär: 5-1-8- bzw. 9-1-4-Phase,
 amorphe Anteile
 + Porenlösung



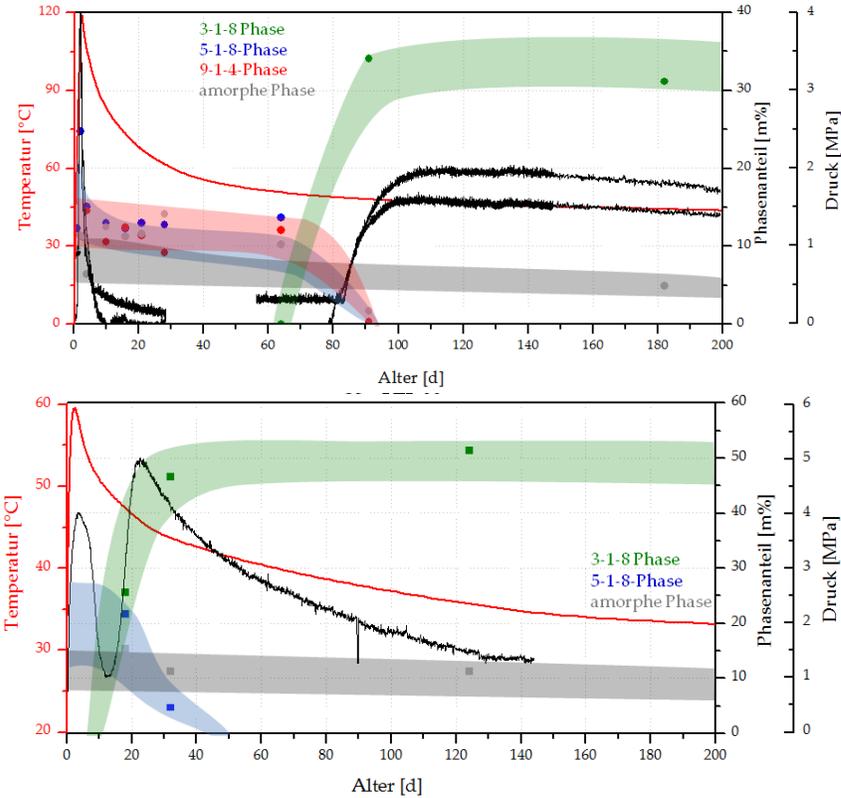
sekundär: 3-1-8-Phase



3-1-8-Rezepturtyp (A1, B2, C3)

Druckverhalten

Molverhältnis im Rezepturansatz
 $\text{MgO} : \text{MgCl}_2 : \text{H}_2\text{O}$
 $\sim 3 : 1 : 11$



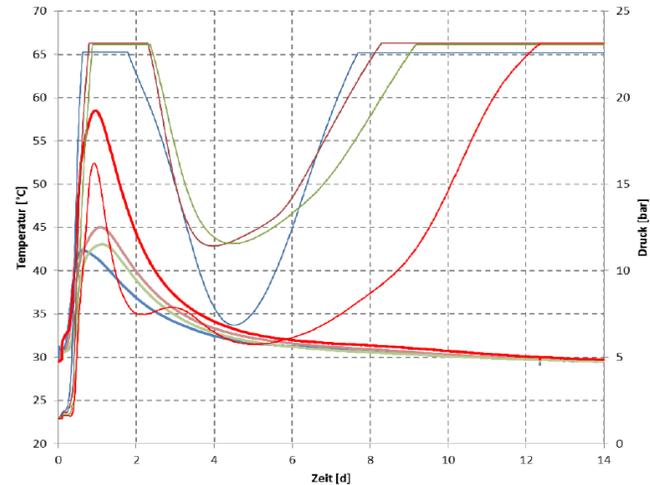
- p-Anstieg korreliert mit Sekundärkristallisation der 3-1-8-Phase
- aufgebauter Druck mit der Zeit rückläufig (Gefügerelaxation)

Stand von W&T – relevante Forschungsprojekte



Großbohrlochversuch 1 (Grube Sondershausen)

- erste Daten für Temperatur- und Druckentwicklung



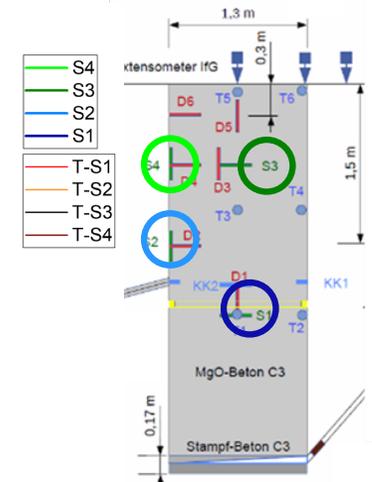
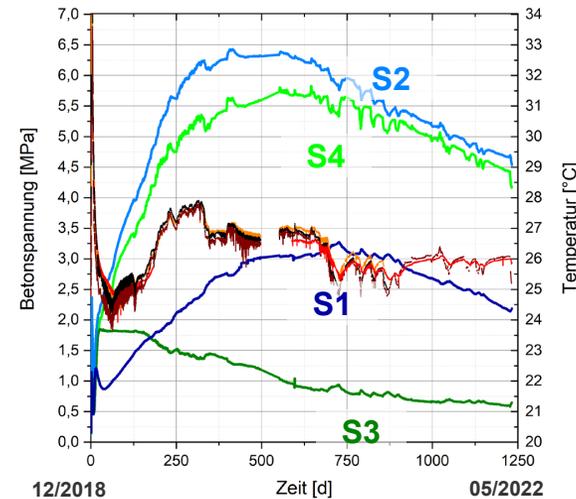
3-1-8-Rezepturtyp

C3
 7 Ma% MgO-LW
 16 Ma% MgCl₂-Lsg.
 65 Ma% Sand/Kies,
 21 Ma% Quarzmehl



Großbohrlochversuch 2 (Grube Teutschenthal)

- umfangreicher instrumentiert
 - Messdaten zur Wärmeentwicklung
 - Daten zur radialen und axialen Druckentwicklung im Zusammenhang mit zweiphasigem Abbindeprozess



Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle: Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen, BMWi FKZ 02E11193A/B

Stand von W&T – relevante Forschungsprojekte



- Fortführung Monitoringprogramm
Großbohrlochversuch 2 (Grube Teutschenthal)

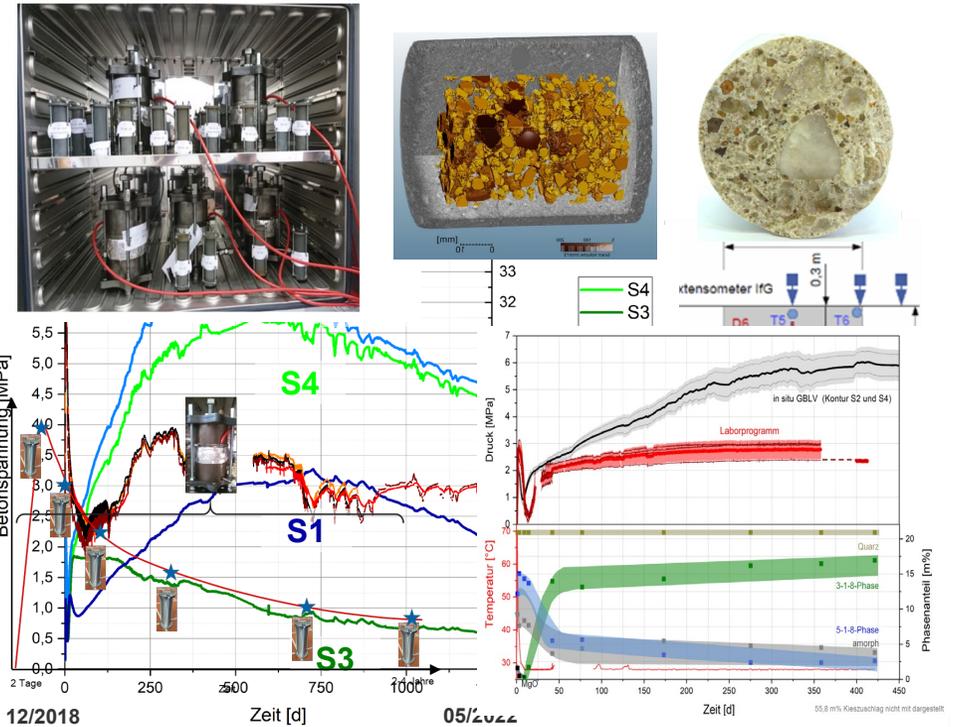
3-1-8-Rezepturtyp

C3
7 Ma% MgO-LW
16 Ma% MgCl₂-Lsg.
65 Ma% Sand/Kies,
21 Ma% Quarzmehl

- system. Untersuchung zum Einfluss Zuschlagkorngerüst
auf sofortige und langanhaltende Druckentwicklung

umfangreiches Laborproben-Monitoring:

- Verfolgung Druckentwicklung
- zeitabhängige Phasenanalyse
- Bestimmung geomech. Parameter (Festigkeit, Relaxation, Gaspermeabilität)
- Gefügeuntersuchungen

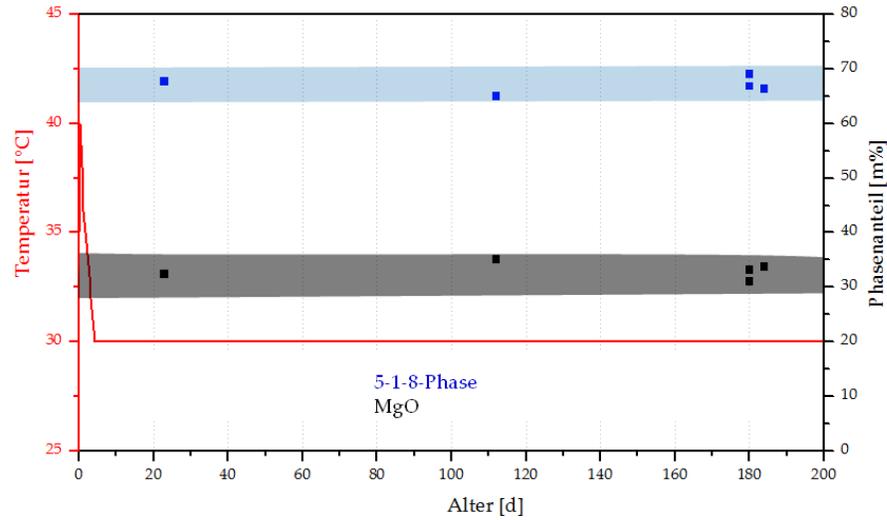


MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar, BMUV FKZ 02E12072A/B

5-1-8-Rezepturtyp (D4)

Phasenbestandsentwicklung

Molverhältnis im Rezepturansatz
 $\text{MgO} : \text{MgCl}_2 : \text{H}_2\text{O}$
> 5 : 1 : 11



primäre und unveränderliche Phasenbildung:

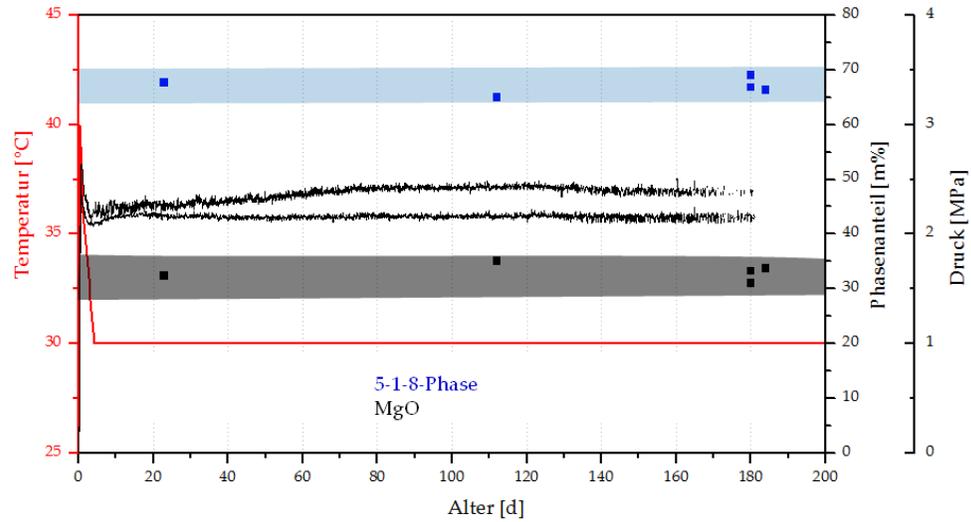
5-1-8-Phase + Rest-MgO

MgCl₂-Lösung vollständig verbraucht

5-1-8-Rezepturtyp (D4)

Druckverhalten

Molverhältnis im Rezepturansatz
 $\text{MgO} : \text{MgCl}_2 : \text{H}_2\text{O}$
> 5 : 1 : 11



➤ keine Druckänderungen

Stand von W&T – relevante Forschungsprojekte



Integritätsnachweis für ein Dammbauwerk mit 5-1-8-Rezeptur

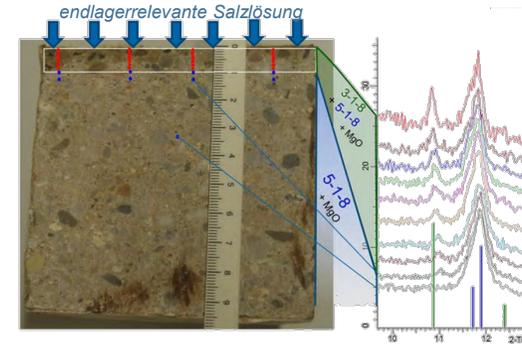
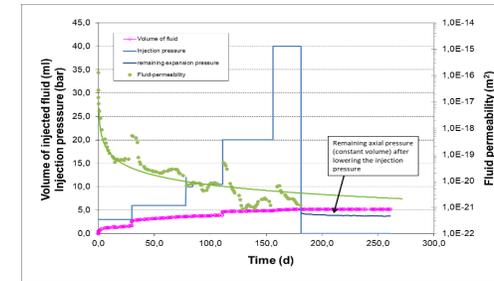
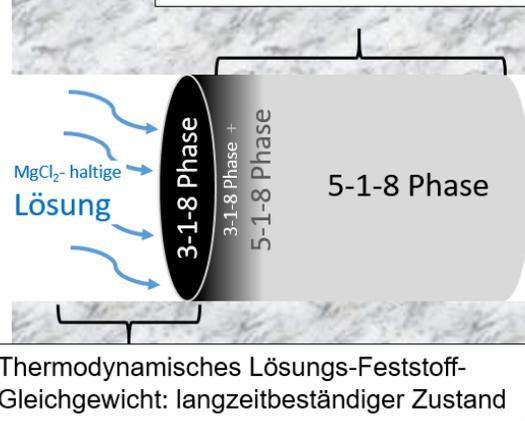
- Nachweis der Langzeit-Sicherheit von geotechn. Barrieren
- Verhalten des Baustoffes nach Kontakt mit endlagerrelevanter Lösung



5-1-8-Rezepturtyp

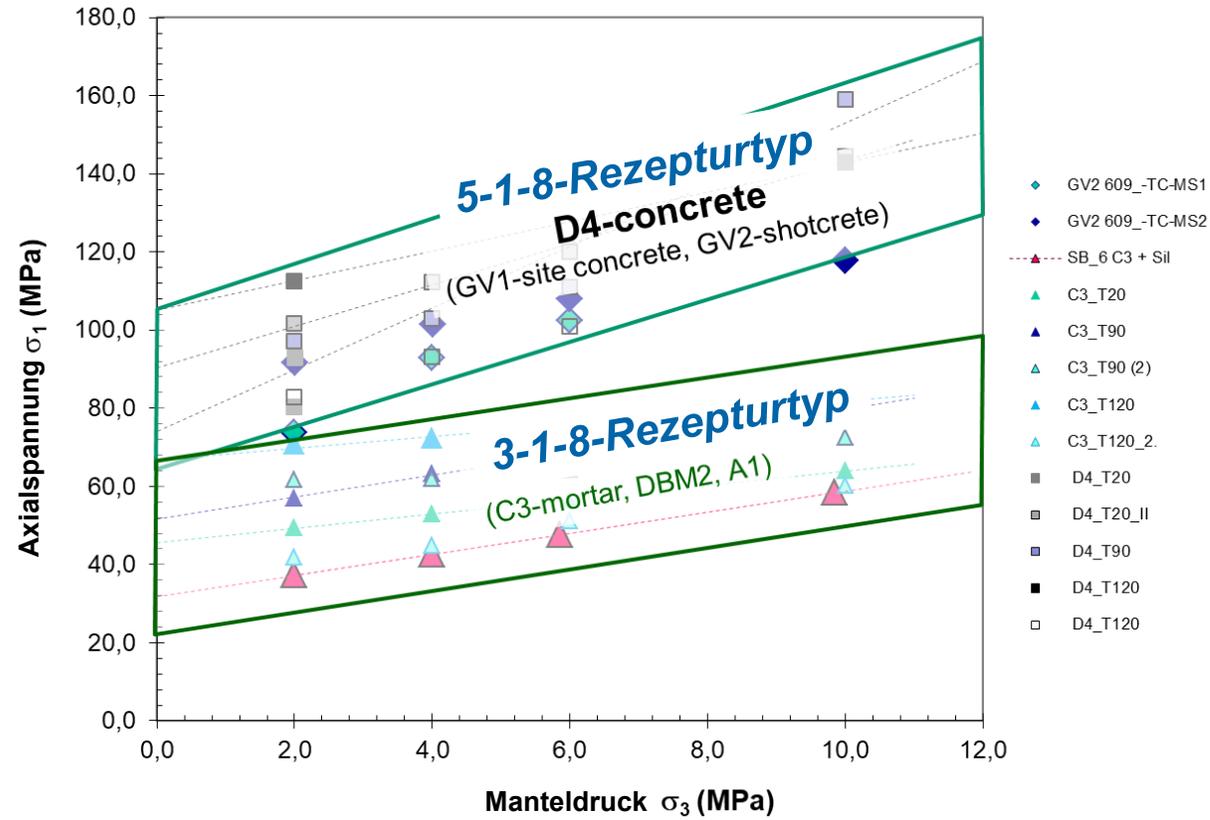
MB10 / D4	
Ortbeton	Spritzbeton
18,2 Ma%	15,6 Ma% MgO
18,2 Ma%	11,5 Ma% MgCl ₂ -Lsg.
63,6 Ma%	72,9 Ma% Sand/Kies

Langzeitbeständiger Zustand außerhalb von Lösungskontakt

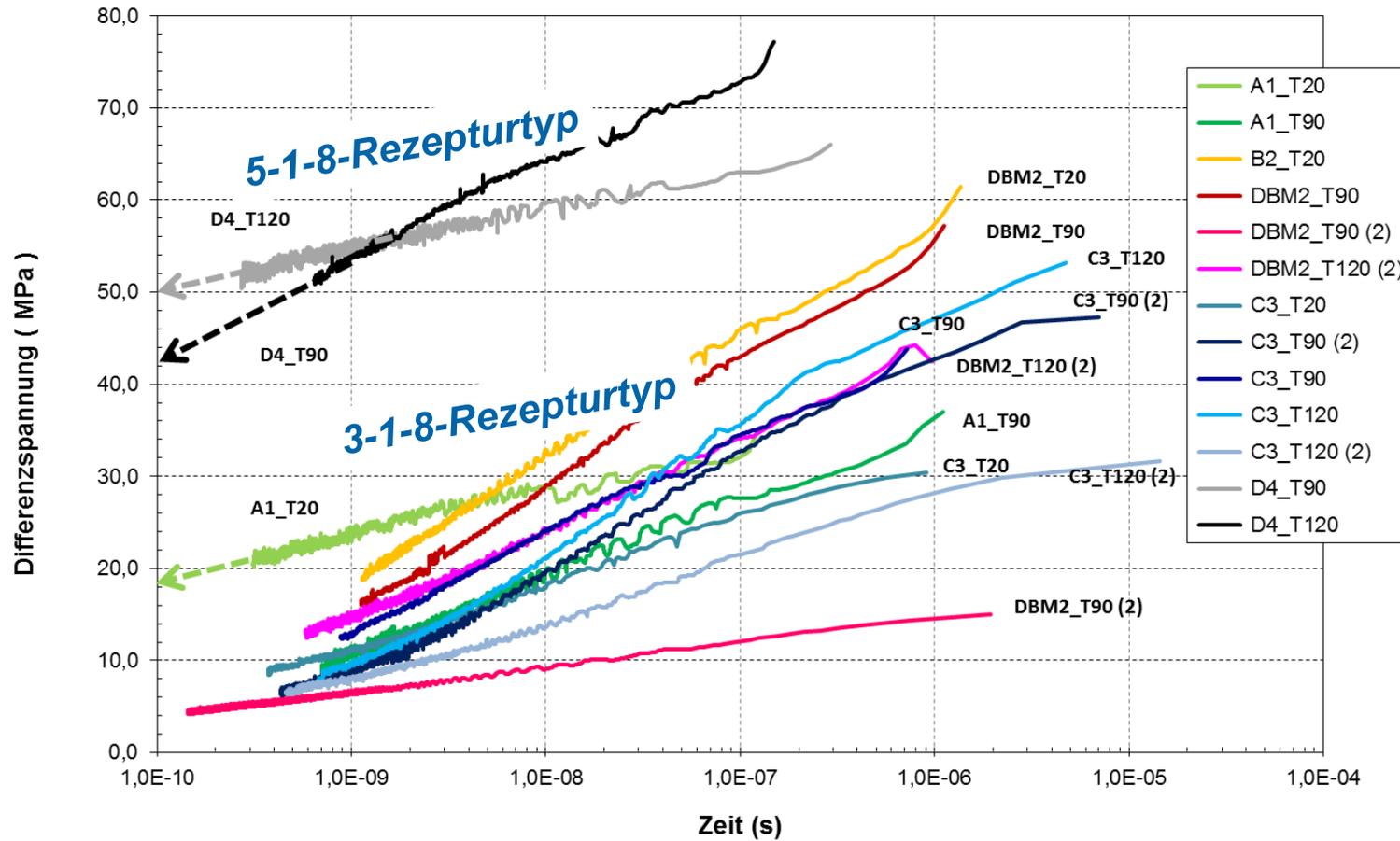


Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Baustoffs, BMWi FKZ 02E10880
 MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl₂-Lösung, BMWi FKZ 02E11435

Festigkeiten



Relaxationsverhalten



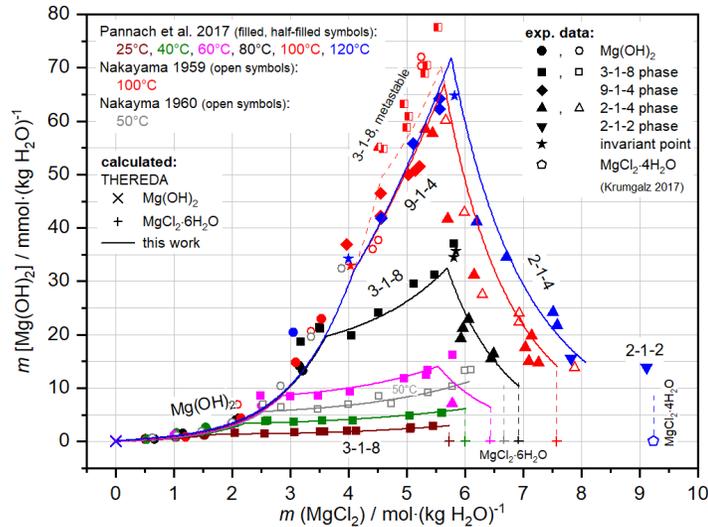
Popp, T., Geomechanische Charakterisierung des Magnesiabaustoffs in Abhängigkeit von der Baustoffrezeptur, Fachgespräch Verschlussysteme aus Magnesiabaustoff (Freiberg 28.-29.04.2015).

Langzeitbeständigkeit Magnesiabaustoff bei Lösungszutritt

3-1-8-Rezepturtyp

Thermodynamischem Lösungs-Feststoff-Gleichgewicht

⇒ 3-1-8-Phase ist therm.-dyn. stabile Phase

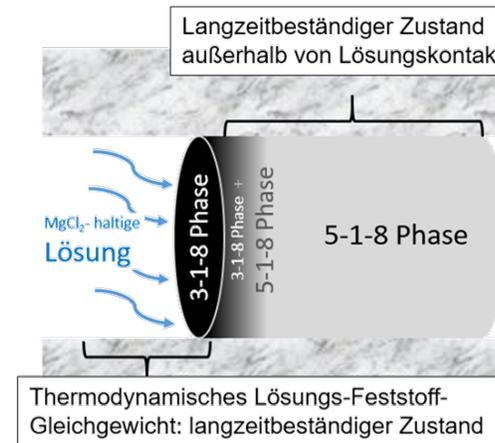


5-1-8-Rezepturtyp

Nachweis basiert auf

Integritätsnachweis

⇒ Bei Lösungszutritt nur oberflächliche Umwandlung in 3-1-8-Phase = Ausbildung „Isolierschicht“
 (Volumenzunahme ⇒ Verschluss Porenraum; Erhalt mech. hydr. Eigenschaften)

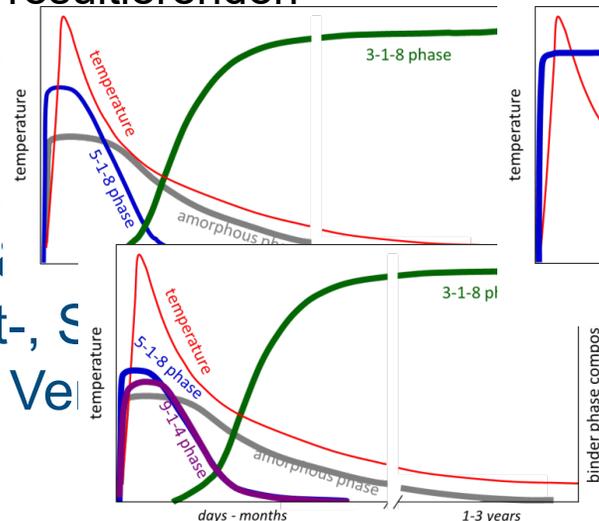


Stand von W&T



- Umfassendes Verständnis für Abbindeprozess des Magnesiabaustoffs
- zwei Rezepturtypen (3-1-8-Typ / 5-1-8-Typ) mit unterschiedlichen Abbindeprozessen (zwei- bzw. einphasig), welche die resultierenden Materialeig

Auf Basis von W&T (Schacht-, S, Ve



Rezepturtyp	„3-1-8“			
Zuordnung bekannter Rezepturen	← A1 →		← DBM2 →	
	← C3 →		← D4 (MB10) →	
Bindemittelphasen-ausbildung nach Abbinden	+ 3-1-8 Porenig 3 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O (= Mg ₂ (OH) ₃ Cl · 4 H ₂ O)	3 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O + 5 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O	5 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O (= Mg ₃ (OH) ₃ Cl · 4 H ₂ O)	5 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O + MgO
Molarer Ansatz		11 (3 - 5) : 1 : (11 - 13)	5 : 1 : 13	(>5) : 1 : 13
		29.18 - 37.95 : 22.98 - 17.93 : 47.84 - 44.11	37.95 : 17.93 : 44.11	>37.95 : 17.93 : 44.11
		Festigkeit		
		kationsverhalten		
		undurchlässig		
		eständigkeit bei Lösungszutritt (NaCl-gesättigt, MgCl ₂ -haltig) im eingespannten Zustand		
Eigenschaften	über thermodynamisches Gleichgewicht zwischen Bindemittelphase und Kontaktlösung		als Integrationsnachweis: das im Bindemittelphasen-Lösungs-System metastabil existierende 5-1-8 Phasengefüge wird bei Lösungszutritt im Kontaktbereich durch die Kristallisation der 3-1-8 Phase eingeschlossen, da mit der Kristallisation gleichzeitig Lösungszugänglichkeiten verschlossen werden. Die Baustoffeigenschaften bleiben erhalten.	
Zuschläge	Zuschläge verschiedener Art und Körnung beeinflussen die geomechanischen Eigenschaften in gewissem Rahmen, bewirken aber keine grundlegenden Veränderungen. Die Zuschläge müssen sich inert gegenüber ablaufenden geochemischen Prozessen verhalten (z.B. Steinsalz (NaCl), Sand, Kies, kristallines Quarzmehl (SiO ₂), Anhydrit, Magnesit)			

„← →“ : Schwankungsbreite bei großtechnischer Herstellung/Verarbeitung

Freyer, D.; Gruner, M. & Popp, T., Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Betons, Freiburger Forschungshefte E15 – Naturwissenschaften (2015) – aktualisiert 2023.



2.7

M. Pannach, I. Paschke und D. Freyer: **Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil 2 - Thermodynamische Berechnung der Beständigkeit im Wirtsgestein Salz (Stand THEREDA)**

The slide cover features a blue background with white text and logos. At the top left is the TU Bergakademie Freiberg logo. Below it is the TUBAF logo with the text 'Die Wissenschaftsinstitution seit 1785'. To the right of these logos is a circular icon containing a magnifying glass and a chemical structure. The main title is centered in large white font: 'Magnesiabaustoff - Stand von W&T: Teil 2' followed by 'Thermodynamische Berechnung der Beständigkeit im Wirtsgestein Salz (Stand THEREDA)'. Below the title, the authors 'Melanie Pannach, Iris Paschke und Daniela Freyer' are listed. At the bottom, the affiliation 'TU Bergakademie Freiberg, Institut für Anorganische Chemie, Salz- & Mineralchemie, TU Bergakademie Freiberg' is provided. The date '05.-07.09.2023' and location 'Braunschweig' are also included. The slide number '413' is in the bottom right corner.

TUBAF
Die Wissenschaftsinstitution
seit 1785

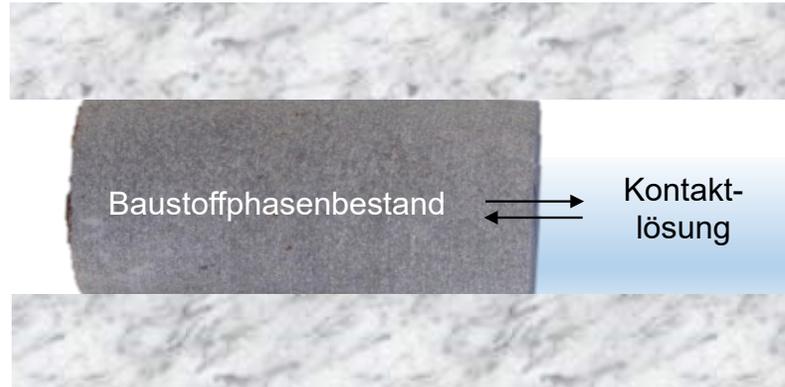
Magnesiabaustoff - Stand von W&T:
Teil 2
**Thermodynamische Berechnung der Beständigkeit
im Wirtsgestein Salz
(Stand THEREDA)**

Melanie Pannach, Iris Paschke und Daniela Freyer
TU Bergakademie Freiberg, Institut für Anorganische Chemie, Salz- & Mineralchemie, TU Bergakademie Freiberg

Workshop „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“, 05.-07.09.2023, Braunschweig

413

Was heißt Beständigkeit von Magnesiabaustoff?



geochemische Langzeitbeständigkeit:

zwischen Baustoffphasenbestand und potentieller Kontaktlösung

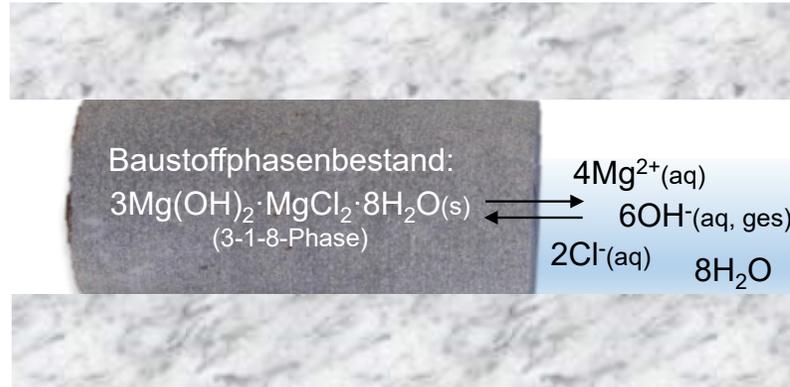


thermodynamisches Löslichkeitsgleichgewicht



Baustoff ist korrosionsbeständig gegenüber der Kontaktlösung
(Zuschlag muss inert gg-über Salzlösungen sein)

Löslichkeitsgleichgewichte – allg. Kenngrößen



wissenschaftlicher Nachweis
 geochemische Langzeitbeständigkeit:

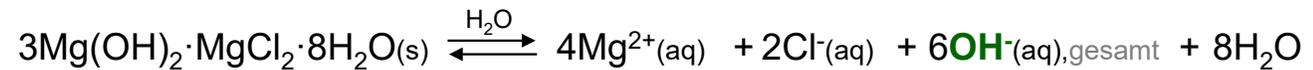
zwischen Baustoffphasenbestand und
 potentieller Kontaktlösung



thermodynamisches Löslichkeitsgleichgewicht

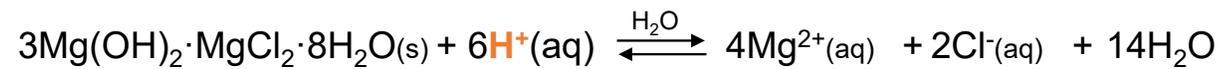
Löslichkeitsdaten für Sorelphasen = Magnesiumchlorid-Hydroxid-Phasen = $x\text{Mg}(\text{OH})_2 \cdot y\text{MgCl}_2 \cdot z\text{H}_2\text{O}$

→ **OH-Konzentration**
 gesamt



$$K_{L,3-1-8} = a(\text{Mg}^{2+})^4 \cdot a(\text{Cl}^{-})^2 \cdot a(\text{OH}^{-})_{(\text{gesamt})}^6 \cdot a(\text{H}_2\text{O})^8$$

→ **H⁺-Konzentration**



$$K_{L,3-1-8} = \frac{a(\text{Mg}^{2+})^4 \cdot a(\text{Cl}^{-})^2 \cdot a(\text{H}_2\text{O})^{14}}{a(\text{H}^{+})^6}$$

→ **Mg²⁺- und Cl-Konzentration**

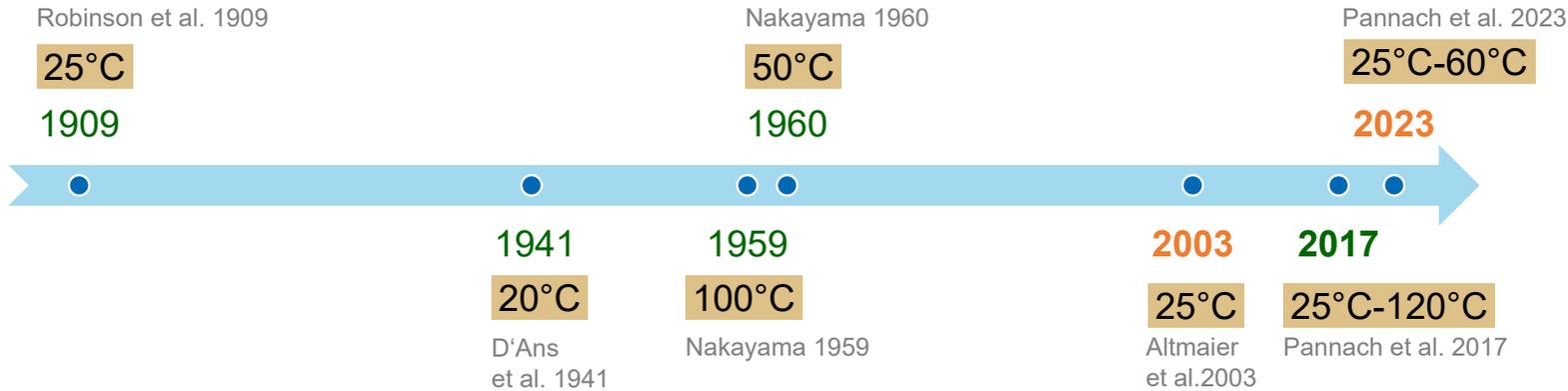
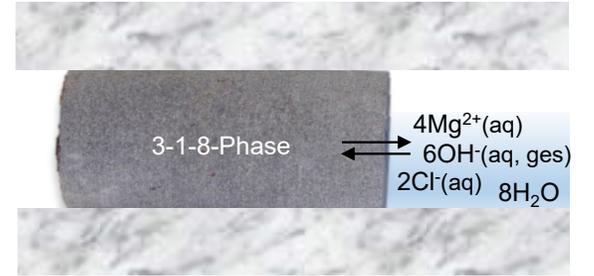
Löslichkeits-
 konstante K_L

Löslichkeitsdaten im System...

OH-Konzentration bzw. H⁺-Konzentration in Abh. Mg²⁺- und Cl⁻-Konzentration

...Mg(OH)₂-MgCl₂-H₂O
 (= Magnesiaazement-Grundsystem)

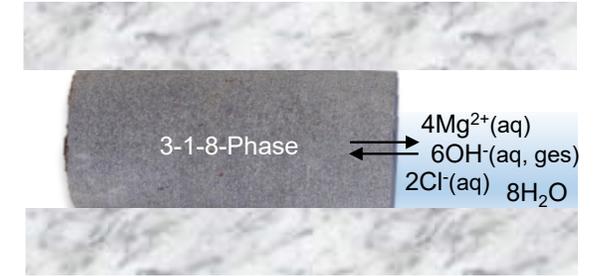
Sorelphasen
 = Magnesiumchlorid-Hydroxid-Phasen
 = xMg(OH)₂·yMgCl₂·zH₂O



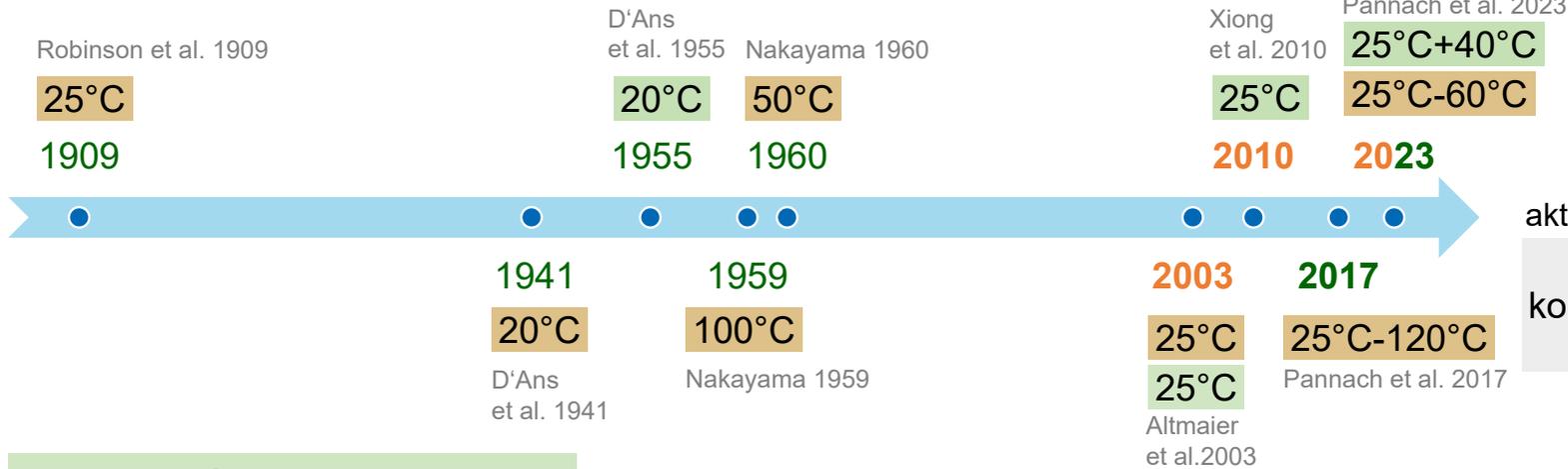
Löslichkeitsdaten im System...

OH-Konzentration bzw. H⁺-Konzentration in Abh. Mg²⁺- und Cl⁻-Konzentration

Sorelphasen
= Magnesiumchlorid-Hydroxid-Phasen
= $x\text{Mg}(\text{OH})_2 \cdot y\text{MgCl}_2 \cdot z\text{H}_2\text{O}$



...Mg(OH)₂-MgCl₂-H₂O (= Magnesiaazement-Grundsystem)



aktuell:
Untersuchung der Lsl.-GG für komplexere NaCl-gesättigte Lösungen (einschl. Sulfat) bei 25°C & 40°C

...Na⁺-Mg²⁺-Cl⁻-OH⁻-H₂O bei NaCl-Sättigung

Willkommen bei THEREDA

Die Thermodynamische Referenzdatenbank (THEREDA) ist für geochemische Modelle im Zusammenhang mit einem Endlager für radioaktive Abfälle konzipiert. Der Schwerpunkt liegt auf der korrekten Berechnung der Löslichkeiten von Radionukliden, Spaltprodukten und Matrixelementen (Baumaterialien und Mineralphasen des umgebenden Wirtgesteins). THEREDA berücksichtigt insbesondere **hochsalzhaltige wässrige Lösungen** (Solen) und unterstützt daher das **Ionen-Wechselwirkungsmodell nach Pitzer**. Es wurden große Anstrengungen unternommen, um die interne Konsistenz der Daten zu gewährleisten. Für das ozeanische Salzsystme ist THEREDA im **Temperaturbereich von 0 bis 110 °C** anwendbar, für einige Teilsysteme sogar darüber hinaus. Damit ist THEREDA die einzige

Datenbank der Welt, die das gesamte System der ozeanischen Salze polythermal abdeckt. Die aktuelle Radionuklidauswahl umfasst **Aktinide (Th, U, Np, Pu, Am, Cm)** und **Spaltprodukte (Se, Sr, Tc, Cs)**. Die meisten Daten für diese Radionuklide sind für 25 °C gültig. THEREDA bietet vorgefertigte Parameterdateien in den Formaten der gebräuchlichsten geochemischen Codes zum Download: **ChemApp, Geochemist's Workbench, PHREEQC und ToughReact**. Der THEREDA-Datensatz wird regelmäßig durch Neuberechnung experimenteller Messwerte einem Benchmarking unterzogen, wobei alle Ergebnisse im Abschnitt "Anwendungsbeispiele" dokumentiert sind. [Mehr lesen](#) ▶

Anwendungsbeispiele

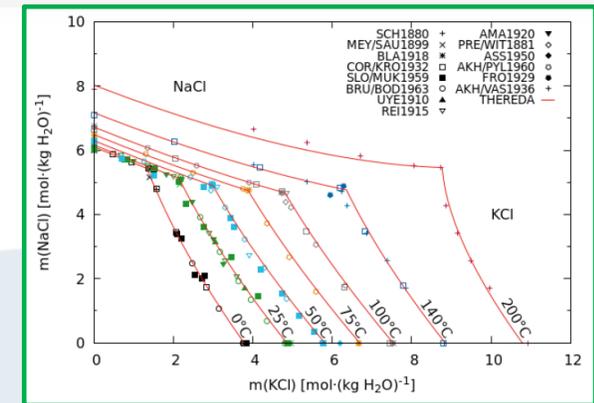
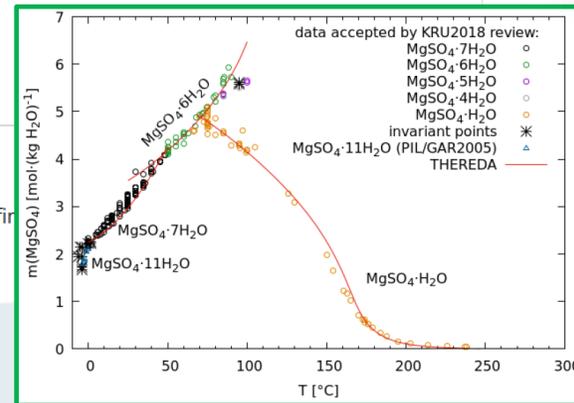
Eine umfassende Übersicht aller chemischen Systeme, für die THEREDA getestet wurde, befindet sich unter [Anwendungsbeispiele](#).

THEREDA-Datenbasis

polytherme Datenbasis,
die das System der ozeanischen Salze
inkl. Säuren und Basen
abdeckt

Ionenwechselwirkungsmodell nach Pitzer (Aktivitätskoeffizientenmodell)

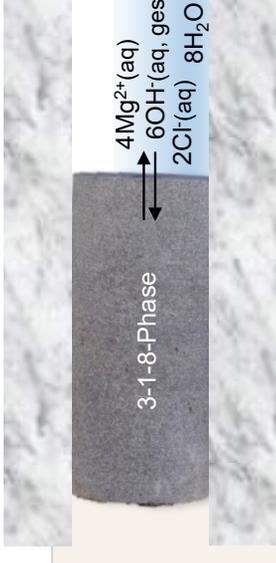
$$\frac{G^{ex}}{w_w \cdot RT} = \underbrace{f(I_m)}_{1. \text{ Term}} + \underbrace{\sum_i \sum_j \lambda_{ij} m_i m_j}_{2. \text{ Term}} + \underbrace{\sum_i \sum_j \sum_k \mu_{ijk} m_i m_j m_k}_{3. \text{ Term}}(I_m)$$



Start [Datenabfrage](#) [Anwendungsbeispiele](#) [THEREDA_Journal](#) [Team](#)

[Anmelden](#)

Anpassung des THEREDA-Datensatzes



THEREDA-Datensatz (Release 2021) wurde folgendermaßen angepasst und erweitert:

- Gültigkeit der Temperaturfunktion der 3-1-8-Phase erweitert bis 100°C
- Gültigkeit der Temperaturfunktion der 2-1-4-Phase erweitert bis 120°C
- Temperaturfunktion für die 9-1-4-Phase implementiert (100°C-120°C)
- basische Lösungsspezies $\text{Mg}_3(\text{OH})_4^{2+}$ mit Temperaturfunktion implementiert (25°C-120°C)
- zugehörige Pitzer-Parameter überarbeitet

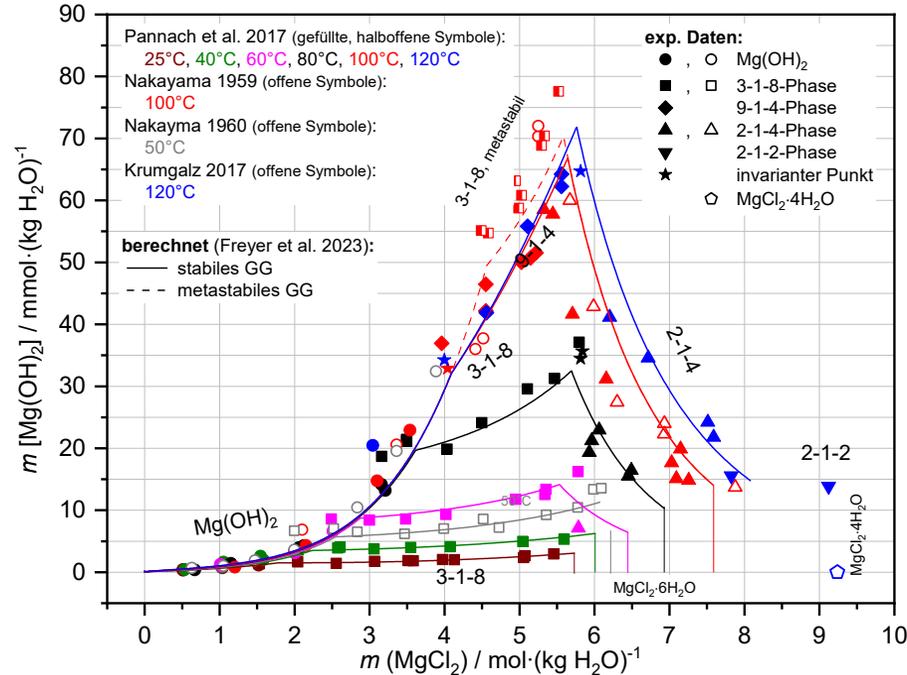
Angepasster THEREDA-Datensatz steht mit dem kommenden Release (geplant für Ende 2023) zur Verfügung.

Eine umfassende Übersicht aller chemischer Anwendungsbeispiele.

Polytherme Berechnungen der Löslichkeitsgleichgewichte

Mg(OH)₂-MgCl₂-H₂O (= Grundsystem)

25°C-120°C



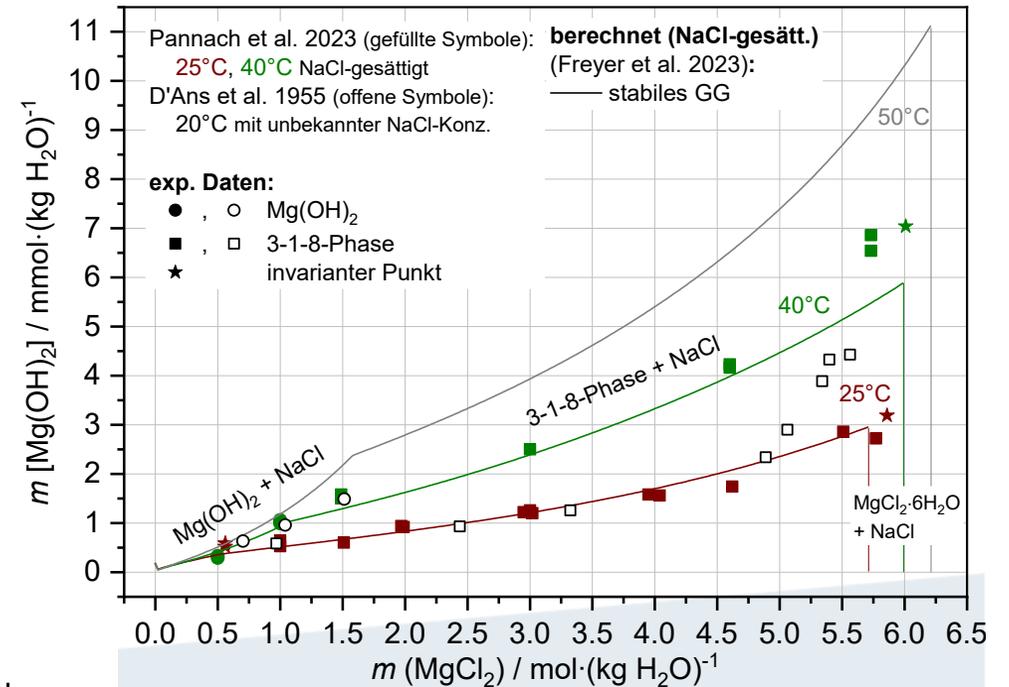
thermodynamisch
stabile Festphasen:

- Mg(OH)₂(s)
- 3-1-8-Phase (≤ 80°C)
- 2-1-4-Phase (≥ 60°C)
- 9-1-4-Phase (≥ 100°C)
- 2-1-2-Phase (≥ 120°C)

.../metastabile Festphasen:
5-1-8-Phase

Na⁺, Mg²⁺, Cl⁻, OH⁻, H₂O (bei NaCl-Sättigung)

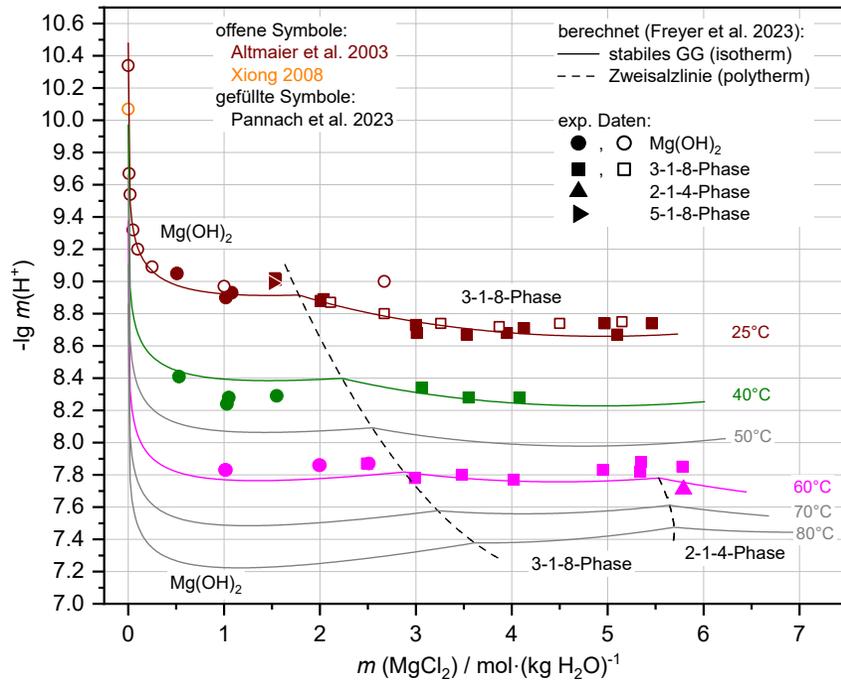
25°C-50°C



Polytherme Berechnungen der H⁺-Gleichgewichtskonzentrationen

Mg(OH)₂-MgCl₂-H₂O (= Grundsystem)

25°C-80°C

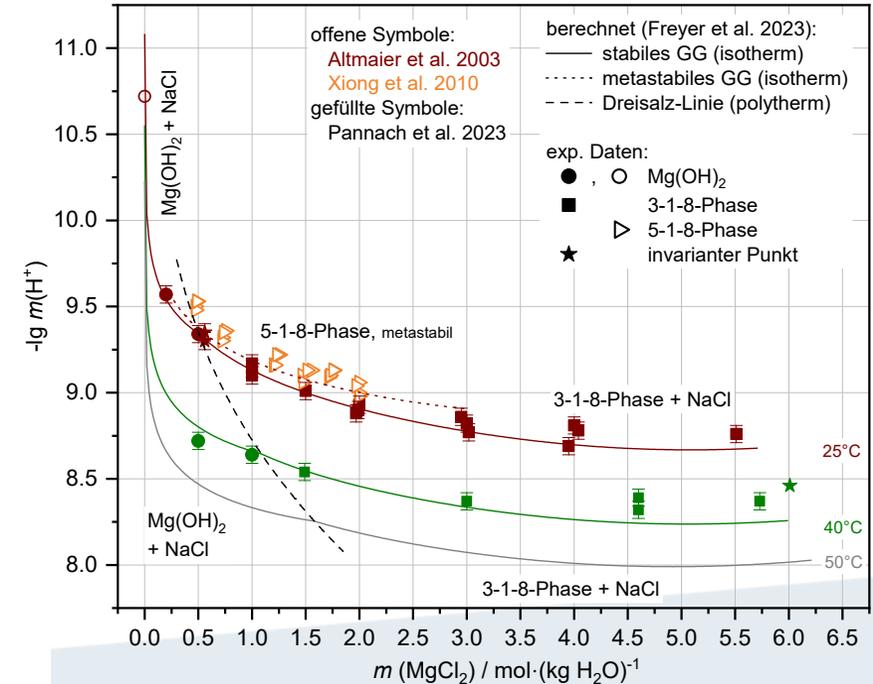


thermodynamisch stabile Festphasen:
 $\text{Mg(OH)}_2(\text{s})$
 3-1-8-Phase ($\leq 80^\circ\text{C}$)
 2-1-4-Phase ($\geq 60^\circ\text{C}$)
 9-1-4-Phase ($\geq 100^\circ\text{C}$)
 2-1-2-Phase ($\geq 120^\circ\text{C}$)

.../metastabile Festphasen:
 5-1-8-Phase

Na⁺, Mg²⁺, Cl⁻, OH⁻, H₂O (bei NaCl-Sättigung)

25°C-50°C



Zusammenfassung

- ✓ **umfangreicher Stand zu W&T ...**

...zur **Phasenbildung während des Abbindens und Erhärtens von Magnesiabaustoff**
(= kinetisch kontrollierte Prozesse, siehe Vortrag Paschke)

...zu den **Löslichkeitsgleichgewichten der Sorelphasen** im System $Mg(OH)_2-MgCl_2-H_2O$ (= Grundsystem des Magnesiazements) wie auch **bei NaCl-Sättigung**

- ✓ **fundierte wissenschaftliche Basis zur Anwendbarkeit des Magnesiabaustoffs als langzeitstabiler Baustoff im Wirtsgestein Salz**

- ✓ **Geochemischen Langzeitbeständigkeit ist über Löslichkeitsgleichgewichte der Sorelphasen in (NaCl-gesättigten) / $MgCl_2$ -Lösungen **bewertbar****

(= Bindemittelphasen des Magnesiabaustoffs)

- ✓ **pH-Pufferwirkung und somit das Radionuklid-Rückhaltevermögen bewertbar**

↳ kann **mittels THEREDA** für versch. Zusammensetzungen von mögl. Kontaktlösungen (im Wirtsgestein Salz) über einen **weiten Temperaturbereich berechnet** werden

Der Nachweis der Langzeitbeständigkeit bei Lösungskontakt ist unabhängig vom Rezepturtyp führbar – über das thermodynamische Löslichkeitsgleichgewicht (3-1-8-Typ) bzw. verbunden mit einem Integritätsnachweis (5-1-8-Typ).



TU Clausthal

Geotechnische Anforderungen an Verschlussbauwerke im Salinar

Workshop “Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar”

Arbeitskreis Betonkorrosion

Deutsche Arbeitsgemeinschaft Endlagerforschung – DAEF

Braunschweig, 05.09.2023 – 07.09.2023

apl. Prof. Dr.-Ing. habil. U. Düsterloh

Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme
★apl. Prof. Dr.-Ing. habil. U. Düsterloh

Workshop „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“
Arbeitskreis Betonkorrosion; Braunschweig, 06-09-2023

423

1



Kapitel 1



Einleitung

Was ist ein Verschlussbauwerk ?

Kapitel 2



Komponenten eines Verschlussbauwerkes

Querschnittsabdichtung, Kontaktfuge, Auflockerungszone, Gebirge

Kapitel 3



Grundsätzliche Anforderungen an Verschlussbauwerke

mechanische, hydraulische, thermische, bautechnische, materialtechnologische, funktionale

Kapitel 4



Nachweisinstrumentarium - Dreieck der geomechanischen Aufgabenbereiche

Laborversuche, Stoffmodelle, numerische Simulation, Validation / Anwendung

Kapitel 5



Zusammenfassung und Ausblick

W & T, Defizite und Aufgaben



Einleitung

Was ist ein Verschlussbauwerk ?



Verschlussbauwerk: Geotechnisches Konstruktionselement, das verhindert, dass Stoffe ungehindert passieren können.

Abdichtungsbauwerk

Geotechnische Barriere

Dichtelement

Querschnittsabdichtung

Streckenverschluss / Streckenabdichtung

Schachtverschluss / Schachtabdichtung

Geotechnisches Verschlussbauwerk

Strömungsbarriere (Oxymoron?)





Kapitel 2



Komponenten eines Verschlussbauwerkes

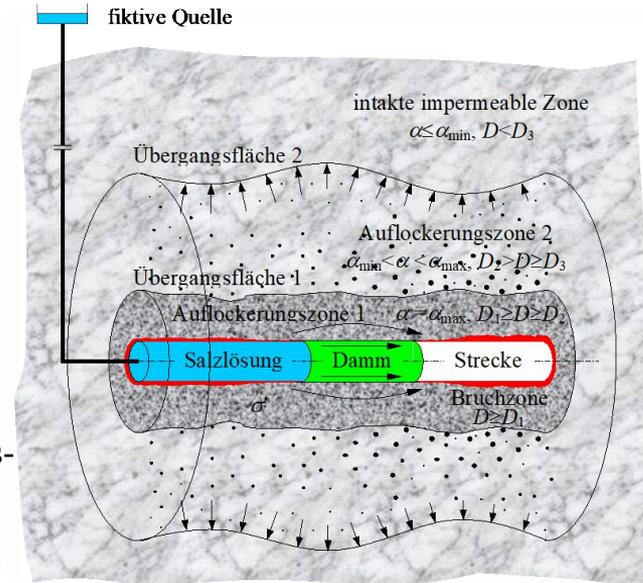
Querschnittsabdichtung, Kontaktfuge, Auflockerungszone, Gebirge

Verschlussbauwerk = viergliedriges Verbundsystem aus

- (1) Bautechnischer Konstruktion
- (2) Kontaktzone
- (3) Auflockerungszone
- (4) Umgebendes, unverritztes Gebirge

Zielstellungen:

- a) Austritt von Schadstoffen aus dem Ablagerungs-Bereich verhindern
- b) Zutritt von Wässern in das Endlager verhindern





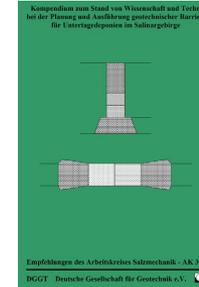
Kapitel 3

Grundsätzliche Anforderungen an Verschlussbauwerke

mechanische, hydraulische, thermische, bautechnische, materialtechnologische, funktionale

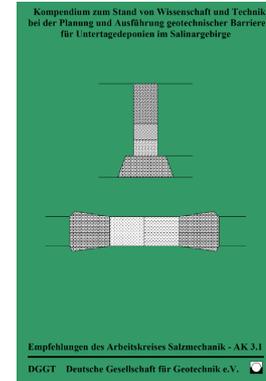


- (1) **Bidirektionale Auslegung (→ Zu- und Austritt von Fluiden)**
- (2) **Redundante und diversitäre Auslegung**
- (3) **Standort- und aufgabenspezifische Auslegung**
- (4) **Durchlässigkeit in der Größenordnung des umgeben Gebirges**
- (5) **Trennung von Dicht- und Tragwirkung (→ Undichtigkeiten Kontaktzone)**
- (6) **Drucktechnische Auslegung gegen hydrostatischen Flüssigkeitsdruck**
- (7) **Dichtwirkung mit Standzeit zunehmend (→ Nachweiszeitraum bis 1 Mio a)**
- (8) **Kurzzeit- und Langzeitdichtelemente (→ Verheilung der geologischen Barriere)**
- (9) **Wartungsfreie Ausführung (→ Endlagerung = nachsorgefrei)**
- (10) **Langzeitbeständige Baumaterialien (→ natürliche Analoga)**
- (11) **Baumaterialien korrosions- und temperaturbeständig gegenüber zutretenden Lösungen**
- (12) **Laborativer Beleg der THMC-Materialeigenschaften**





- (13) Standort Verschlussbauwerk in homogenem und tektonisch unbeeinflussten Gebirgsbereich**
- (14) Standortbezogene Nachweisführung wegen Wechselwirkung zwischen Gebirge und Bauwerk**
- (15) Frühzeitige Durchführung von insitu Messungen vor Einbau der Verschlussbauwerke**
- (16) Demonstrationsversuch für bautechnische Machbarkeit**
- (17) Demonstrationsversuch für Funktionalität**
- (18) Zeitraum für Nachweisführung = Zeitspanne des planmäßigen Funktionszeitraumes**
- (19) Qualitätsmanagementsystem**
- (20) Geeignete Untersuchungen im Technikumsmaßstab**





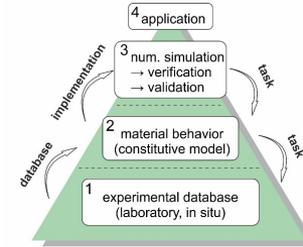
Kapitel 4

Dreieck der geomechanischen Aufgabenbereiche

Laborversuche, Stoffmodelle, numerische Simulation, Validation / Anwendung



Geomechanisches Instrumentarium zur Prognose und Bewertung des Trag- und Dichtigkeitsverhaltens von Verschlussbauwerken:



(1) Versuchstechnik Labor und Feld:



M: $\beta^{TCE}, \beta^{Rest}, \beta^{Dil}, \beta^Z, \epsilon^{el}, \epsilon^{tr}, \epsilon^{st}, \epsilon^t, \epsilon^{vol}, \epsilon^h, E, \nu, c, \phi, \gamma, \dots$



H: $\phi, K, k_f, \eta, S, D, \dots$



T: $\alpha, \lambda, c, \lambda_{th}, \dots$



C: pH, Batchv., Kaskadenv., Korrosion, Stöchiometrie, ...



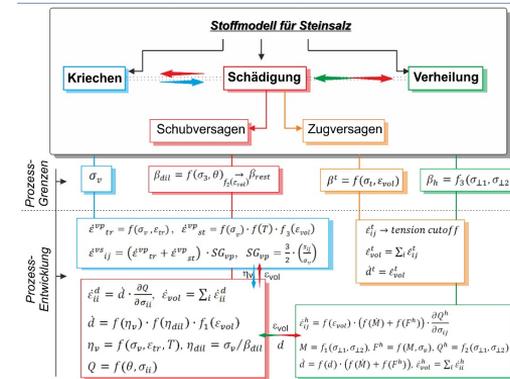
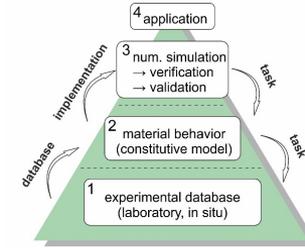
B: C, Degradation, ...



Geomechanisches Instrumentarium zur Prognose und Bewertung des Trag- und Dichtigkeitsverhaltens von Verschlussbauwerken:

(2) Stoffmodelle:

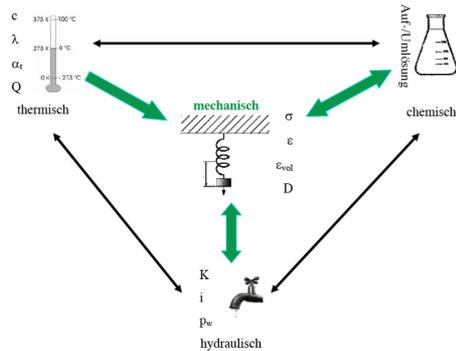
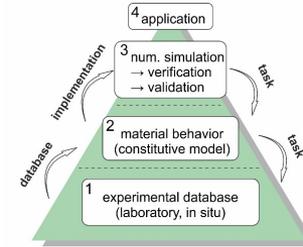
- Festigkeit,
- Kriechen, Plastizität, Elastizität
- Porosität-Permeabilität / Perkolation
- Hydratation
- Quellen / Kristallisation



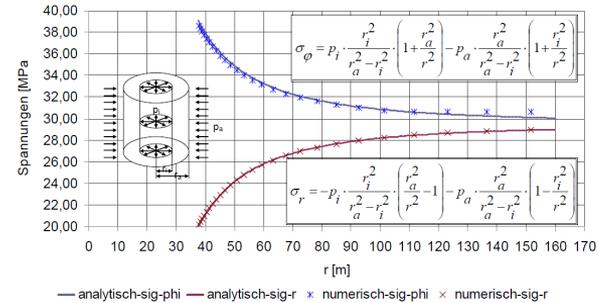


Geomechanisches Instrumentarium zur Prognose und Bewertung des trag- und Dichtigkeitsverhaltens von Verschlussbauwerken:

(3) Numerische Simulation:
Verifikation, Validation



Hohlzylinder unter Innen- und Außendruck (elastisch, isotrop)

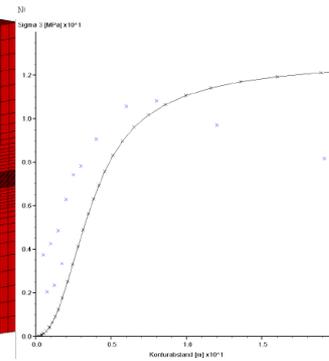
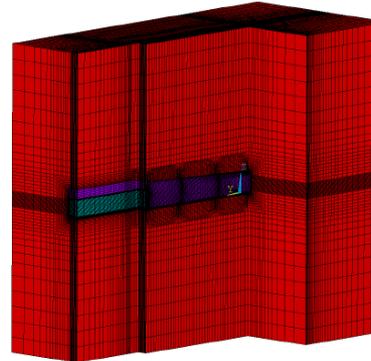
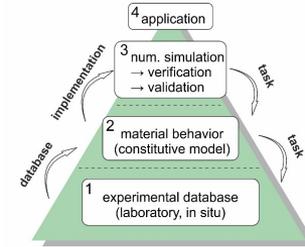




Geomechanisches Instrumentarium zur Prognose und Bewertung des trag- und Dichtigkeitsverhaltens von Verschlussbauwerken:

(4) Standortbezogener Nachweis:

Standicherheit, Funktionalität, Integrität, Langzeitsicherheit





Kapitel5

Zusammenfassung und Ausblick

W & T, Defizite und Aufgaben



Aufgaben und Randbedingungen Verschlussbauwerke:

- Prädiktiver Nachweis des sicheren bzw. vollständigen Einschlusses
- Verbundsystem → standortspezifischer Nachweis
- Nachsorgefrei → keine Wartung / Reparatur
- Nachweiszeitraum → ohne Beleg (Analoga)
- Berücksichtigung aller Bau- Betriebs- und Nachbetriebsphasen
- Keine Möglichkeit, die Funktionalität des finalen Bauwerkes zu testen





Troubleshooting Verschlussbauwerke:

- THM-Verhalten im Kontaktbereich zwischen Baustoff und Gebirge unter Berücksichtigung von $\sigma(x,t)$, $T(x,t)$, $K(x,t)$
- Langzeitbeständigkeit /-verträglichkeit von Baustoffen
- Integration C in THM-Analyse
- THM Materialeigenschaften und Prozesse bei erhöhter Temperatur
- Funktionalitätsprüfung Verschlussbauwerk nach Errichtung
- Systematische Berücksichtigung von Maßstabeffekten





**Thank you for paying
attention!**



Wie messe ich was – Mechanische Versuche zur Charakterisierung von Verschlussbaustoffen

Dirk Naumann, Till Popp – Institut für Gebirgsmechanik Leipzig GmbH

*Workshop „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“
des Arbeitskreises Betonkorrosion (AKB) im Rahmen des DAEF*

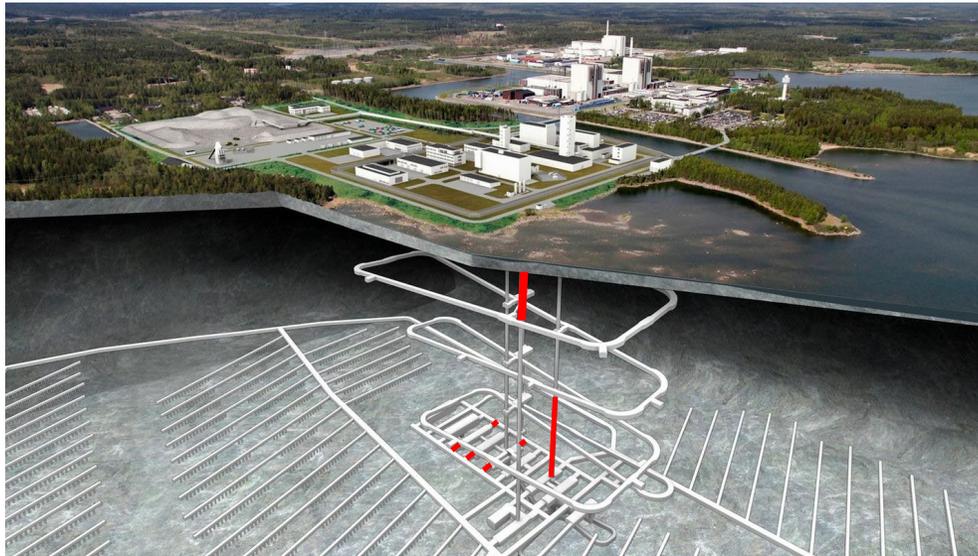
Braunschweig – 05.-07.09.2023



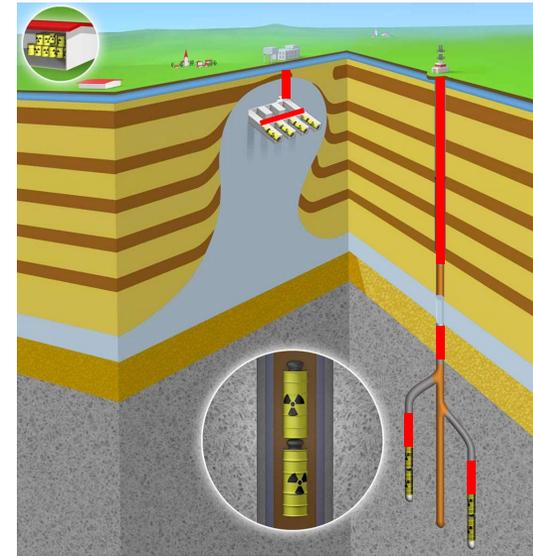
Workshop „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“ des Arbeitskreises Betonkorrosion (AKB) im Rahmen des DAEF – Braunschweig, 05.-07.09.2023



- Veranlassung?
- Was wird benötigt?
- Was bedeutet geeignet?
- Was will man erreichen?
- Was prüft man?
- Wie prüft man?
- Was erhält man?
-



<https://image.stern.de/31585986/t/v5/v2/w1440/r1.7778/-/grafik.jpg>

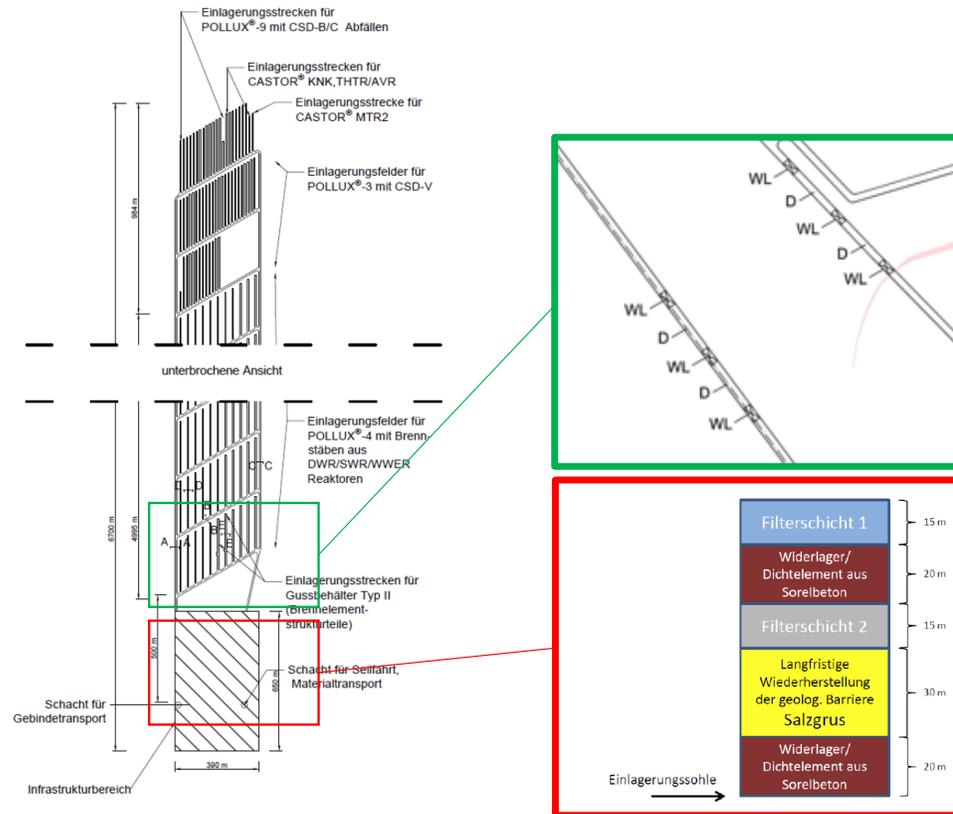


<https://www.formgeber.de/wp-content/uploads/2017/08/endlagerung-1592x1193.jpg>

Ziel: Errichtung/Bau von **Schacht-** und **Streckenverschlüssen** (im Endlager bzw. bei Stilllegungsmaßnahmen)

Verschlusskonzept Endlager

Abbildung des vollständigen Grubengebäudes aus RESUS (2020)



Streckenverschluss

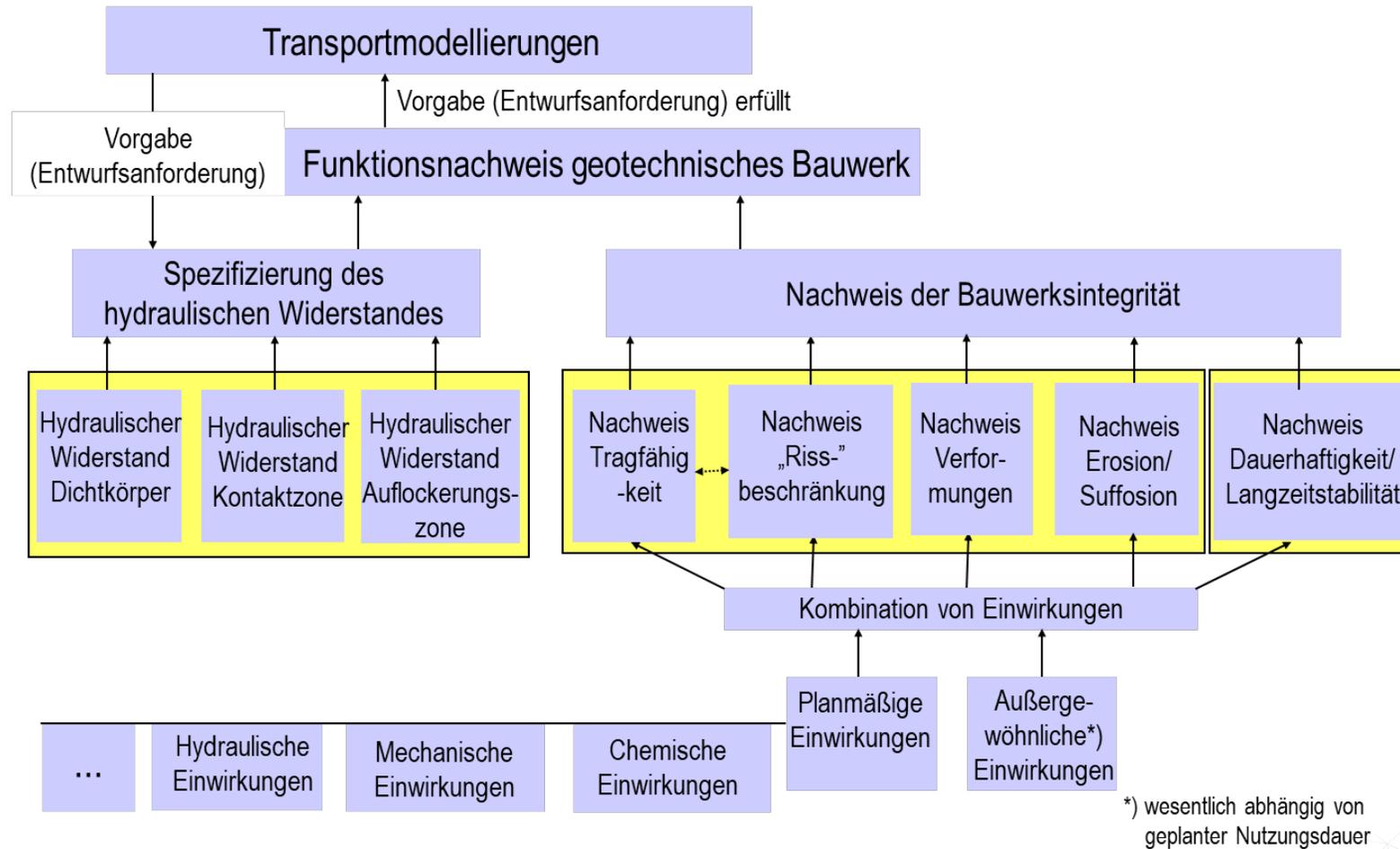
- Widerlager, z.B. **Salz- oder Sorelbeton**
- Dichtungen
 - Schnell wirksam: **Salz- oder Sorelbeton**
 - Arteigenes Material: Salzgrus befeuchtet (KOMPASS-Material)
 -

Schachtverschluss (diversitär)

- Widerlager, z.B. **Salz- oder Sorelbeton**, Schotter ...
- Dichtungen
 - **Salz- oder Sorelbeton**
 - Salzgrus befeuchtet (KOMPASS-Material)
 - Bitumen / Asphalt
 -

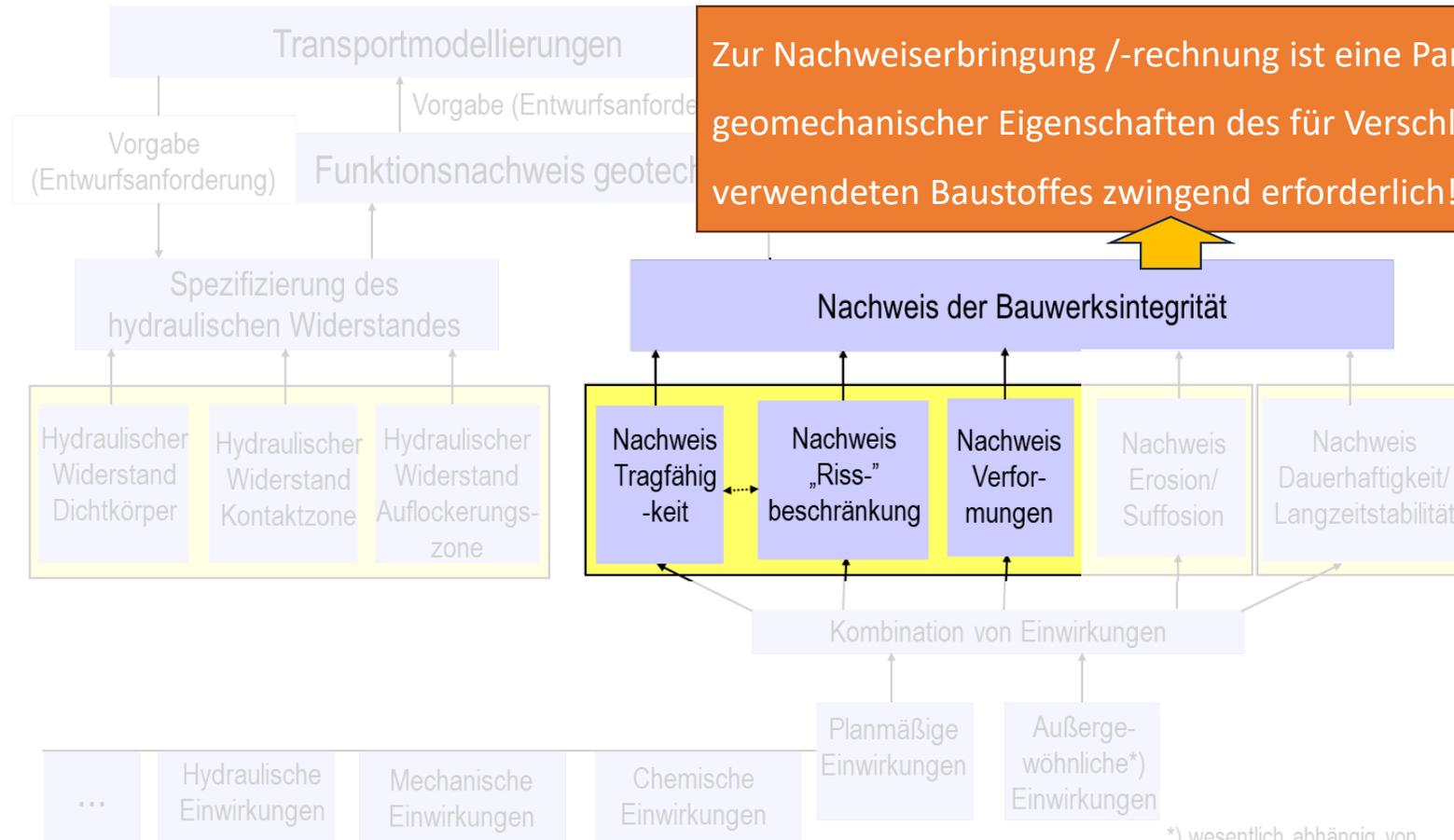
Struktur des Nachweises Schachtverschluss Gorleben 1

aus MUELLER-HOEPPE



Struktur des Nachweises Schachtverschluss Gorleben 1

aus MUELLER-HOEPPE (XXXX)



Zur Nachweiserbringung /-rechnung ist eine Parametrisierung geomechanischer Eigenschaften des für Verschlussmassnahmen verwendeten Baustoffes zwingend erforderlich!

*) wesentlich abhängig von geplanter Nutzungsdauer

Ein – geeigneter – Baustoff soll:

- Lasten (resultierend aus dem Gebirgsdruck) aufnehmen bzw. ableiten
- Verformungen begrenzen
- Standsicherheit des Grubengebäudes erhalten
- Lösungszutritte limitieren
- Zustand der geologischen Barriere aufrechterhalten

***Standsicherheit
/Stützfunktion***

Barrierefunktion

Untersuchung/Nachweis der *Standicherheit/Stützfunktion*
durch:

-> *Mechanische Untersuchungen*

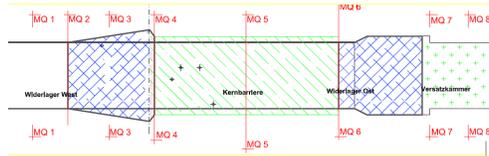
Untersuchung/Nachweis der *Barrierefunktion* durch:

-> *Hydraulische Untersuchungen*

Massenbaustoffe: je nach Einsatzzweck Widerlager- / Dicht-Elemente				Dichtbaustoffe	Verfüllmaterialien
Zement-basiert (hydraulischer Binder)		MgO-basiert (Sorel-Binder)		Bentonit	Kies
Salzbeton	Solebeton	3-1-8 Rezepturen	5-1-8 Rezepturen	Asphalt ($\rho_A > \rho_{fi}$)	Salzgrus / GESAV
<ul style="list-style-type: none"> Granularer Steinsalzzuschlag Wasser / -NaCl-Anmischlösung Zement-Binder sowie Additive 	<ul style="list-style-type: none"> Norm-Silikatzuschlag Wasser / -NaCl-Anmischlösung Zement-Binder 	Beispiele: A1 (Asse), C3 (TU-BAF), DBM2 (K-UTEC) <ul style="list-style-type: none"> Granularer Steinsalz- oder Silikatzuschlag MgO-Binder MgCl₂-Anmischlösung 	Beispiele: MB10 (CARLA) <ul style="list-style-type: none"> Silikatzuschlag / Salzgrus MgO-Binder MgCl₂-Anmischlösung 	<ul style="list-style-type: none"> Granulat Formsteine Binäres Gemisch > Widerlager erforderl. > Stabil im Salinar (Analogon Salztone)	> Reine Verfüllsäule > GGfs. nicht setzungsstabil / Nachverfüllung > Gestufte Kornfraktion entsprechend Grundwasserhorizont
Ortbeton	Ortbeton	Ort- (Spritz)-Beton	Ort- / Spritzbeton	Bitumen ($\rho_B < \rho_{fi}$)	Schotter
Im NaCl-Milieu - beständig	Im NaCl-Milieu - beständig	Im Kontakt mit MgCl ₂ Lsg. chemisch Langzeitstabil	Im Kontakt mit MgCl ₂ Umwandlung in 3-1-8 Phase (indirekt stabil)	<ul style="list-style-type: none"> Asphalt-Mastix Faser-Asphalt Asphalt-Matten > Widerlager erforderl. > Inert im Salinar	> Arteigen > Langzeitdichtung nach Kompaktion durch Konvergenz > Widerlager erforderl.
Mit MgCl ₂ – Lsg.: unbeständig (Korrosion)	Mit MgCl ₂ – Lsg.: unbeständig (Korrosion)	Mit MgCl ₂ – Lsg.: unbeständig (Korrosion)	Mit MgCl ₂ – Lsg.: unbeständig (Korrosion)	> Selbstabdichtung	> Verfüllsäule > Setzungsstabil / Lastabtrag (Widerlager) > Sicherung Füllortbereiche
– abhängig von der Baustoffrezeptur und Einbring.-Technol.		– abhängig von der Baustoffrezeptur und Einbring.-Technol.		Extrem hoch	
• Schwinden / keine chem. Langzeitstabilität		• Wasserlöslichkeit / Löslichkeit bei NaCl-Lsg.			
> viele bergbauliche Erfahrungen für Schächte > Solebeton – Normzuschläge > Klassierter Salzgrus einfach verfügbar		> Mindestens Volumen-konstant > Eigenschaften über Rezeptur einstellbar / z.B. für 3-1-8-Rezeptur temporärer Expansionsdruck			
				Schottersäule mit Bitumen ($\rho_B < \rho_{fi}$)	
				> Lastabtragende Funktion > Diversitäres Dichtelement > Geringe Erfahrungen / Einbringproblematik	

Entwicklungsrichtungen

StrömungsbarriereASSE
Rezeptur A1



Versuchsbauwerke CARLA
Rezeptur D4

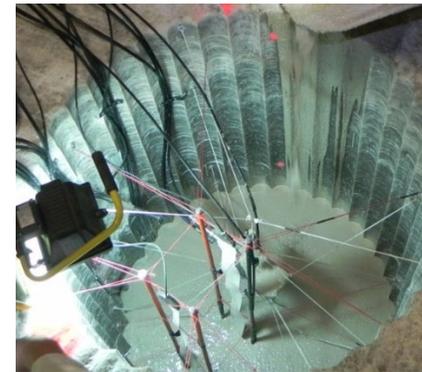
GV1: als Ortbeton



GV2: als Spritzbeton



Großbohrloch ELSA II
Rezeptur C3





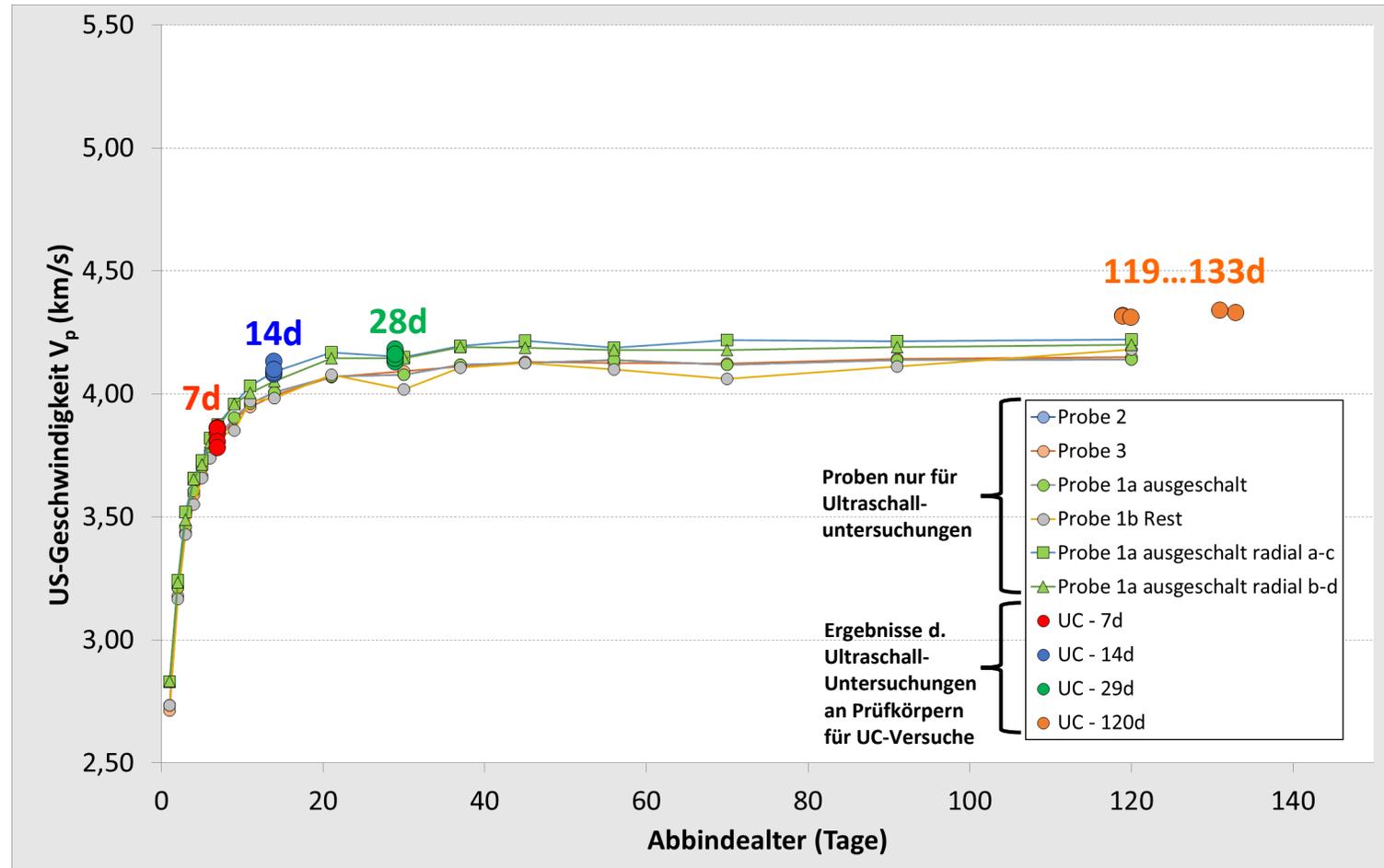
Rheologische Messungen des angemischten Baustoffs zur Qualitätssicherung der Probenherstellung
(Konsistenzmessungen, wie beispielsweise Bestimmungen mit der Fließrinne,
des Setzfließmaßes sowie dem Marshtrichter, Luftporengehalt und Suspensionsdichte)
-> **Reproduzierbarkeit** (der geforderten Qualität)

Vor den eigentlichen mechanischen, experimentellen Untersuchungen (an intakten, abgebundenen Baustoffproben / Prüfkörpern) erfolgen essentiellen Voruntersuchungen wie (u.a.):

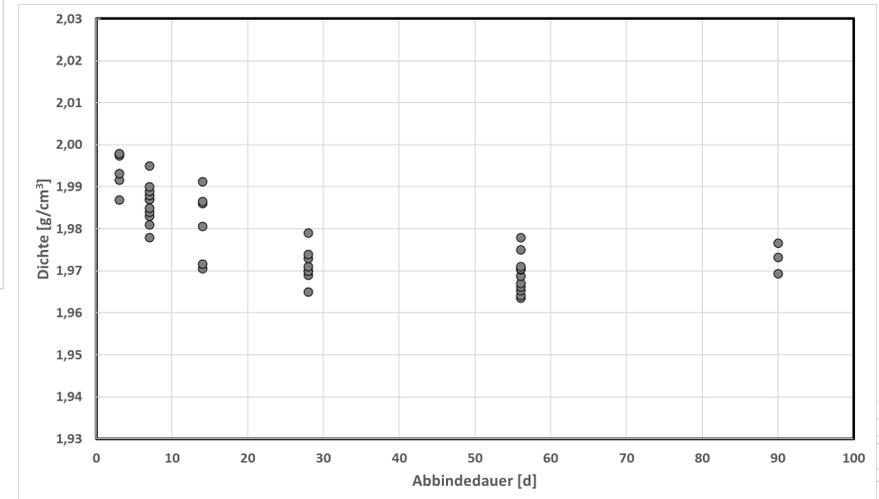
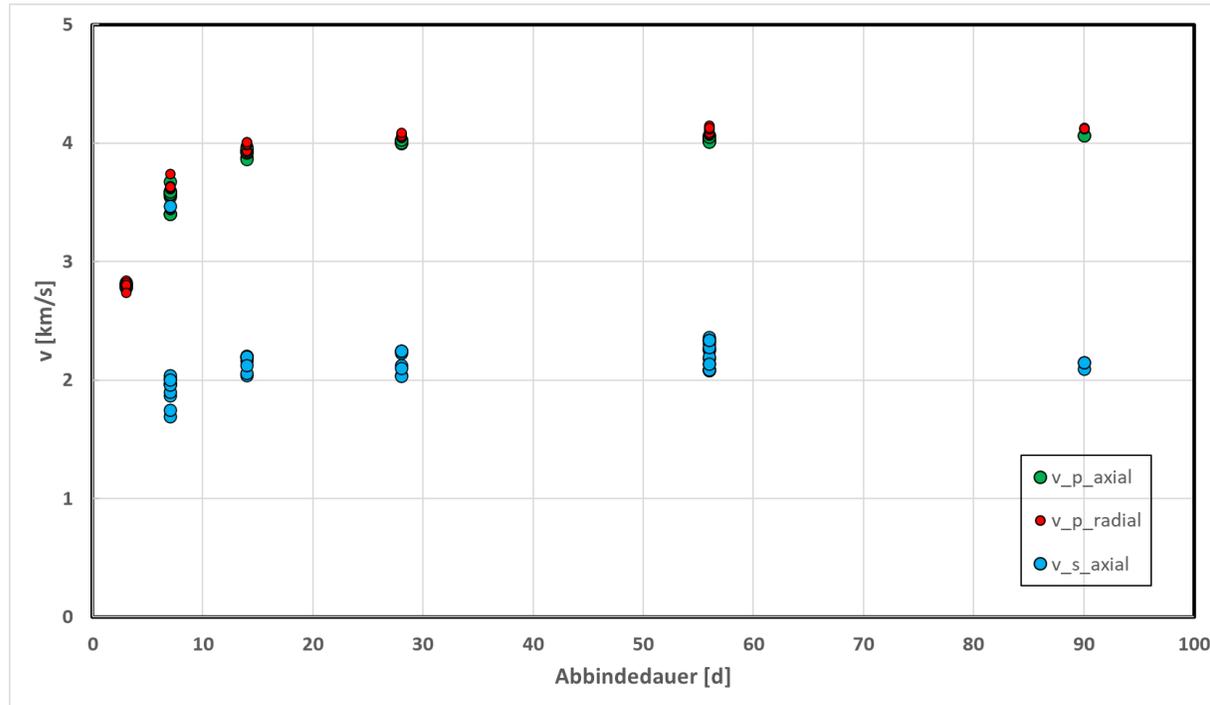
- Ultraschalluntersuchungen zur Überprüfung der Intaktheit / Integrität der Proben bzw. hinsichtlich der Homogenität
- Vermessung/Wägung zur Ermittlung der Rohdichte



Untersuchungen unter Berücksichtigung der zeitlichen Entwicklung, d.h. des Abbindealters



Ultraschalluntersuchungen und Rohdichtebestimmung an zylindrischen Baustoffproben



Mechanische Untersuchungen = experimentelle Parameterbestimmung von geomechanischen Eigenschaften des Baustoffes (zur geomechanischen Nachweisführung mittels Modellrechnungen)

- *Einaxiale Druckfestigkeit (Zylinder und Würfel)*
- *Statischer Elastizitätsmodul*
- *Statische Querkontraktionszahl*
- *Einaxiale Zugfestigkeit (direkte oder als Spaltzugfestigkeit)*
- *Scherfestigkeit*
- *Triaxiale Druckfestigkeit und Dilatanzverhalten*
- *Kriechverhalten: Druckkriechen (isotrop und/oder deviatorisch)*
- *Kriechverhalten: Zugkriechen*

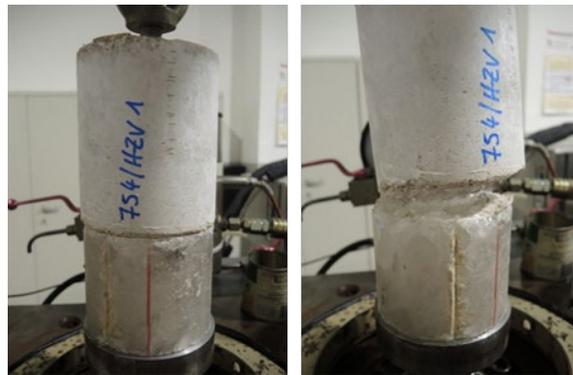
am reinen Baustoff



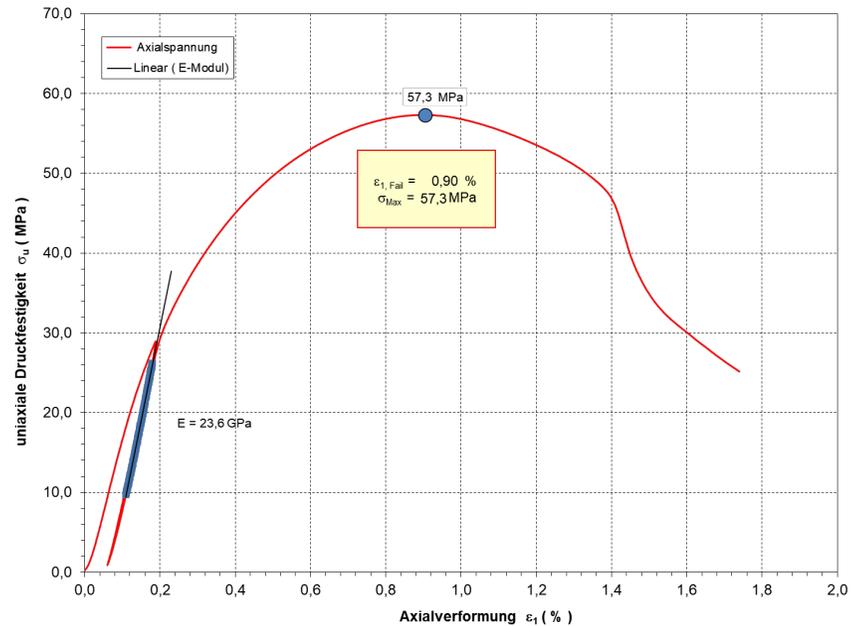
Mechanische Untersuchungen = experimentelle Parameterbestimmung von geomechanischen Eigenschaften, speziell Quantifizierung des mechanischen Kontaktes (z.B. für die Widerlagerfunktion) -> Nachweis der Funktion ohne Festigkeitsversagen (Bereich Kontaktzone)

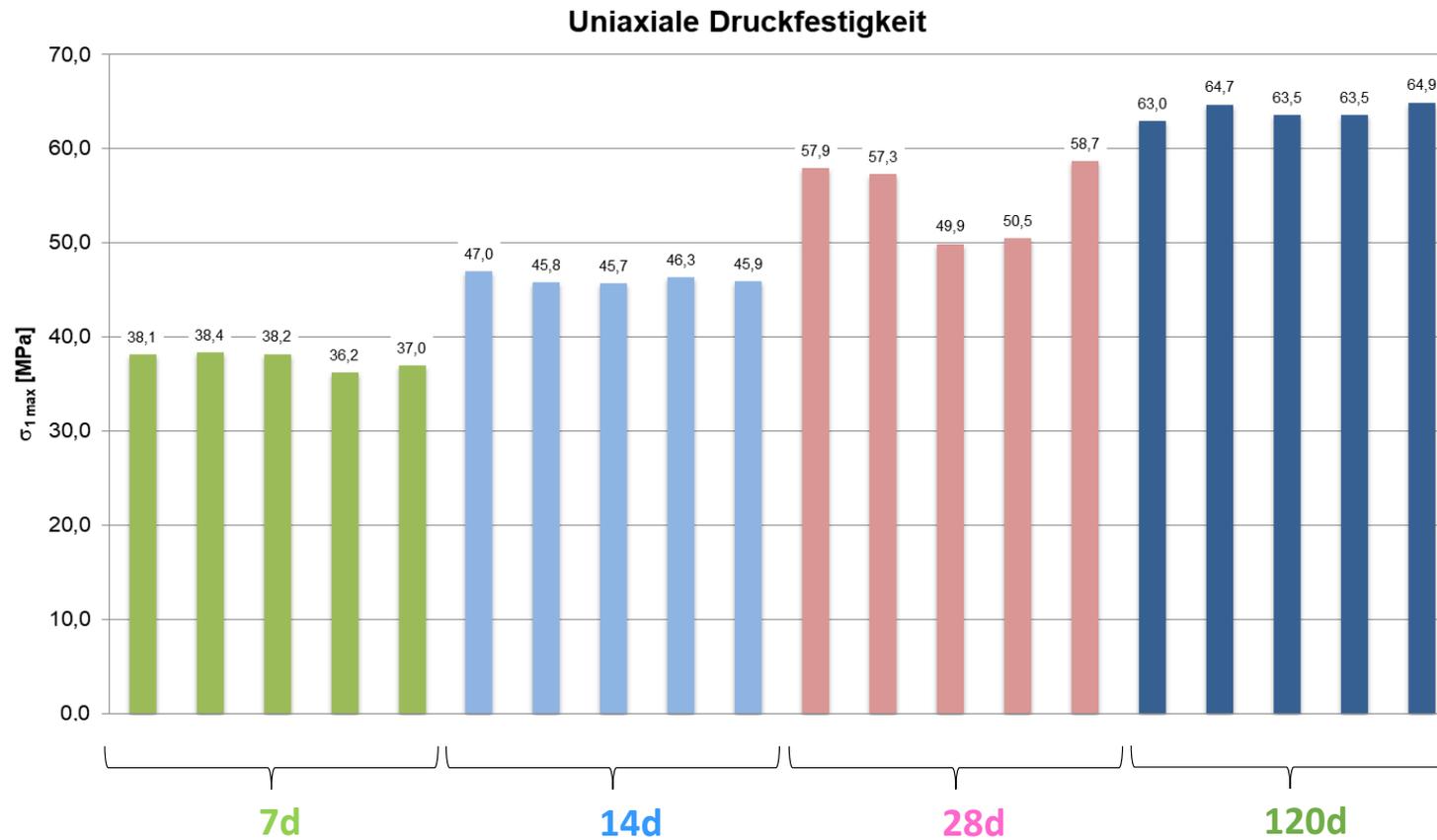
- Haftzugfestigkeit: Kontaktfläche Baustoff – Gebirge (z. B. **Steinsalz** / Anhydrit / Carnallit / Hartsalz)
- Scherfestigkeit: Kontaktfläche Baustoff – Gebirge (z. B. **Steinsalz** / Anhydrit / Carnallit / Hartsalz)

am Kontakt zwischen Baustoff und Gebirge



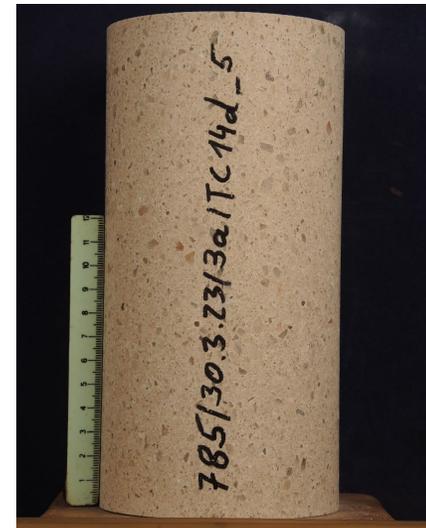
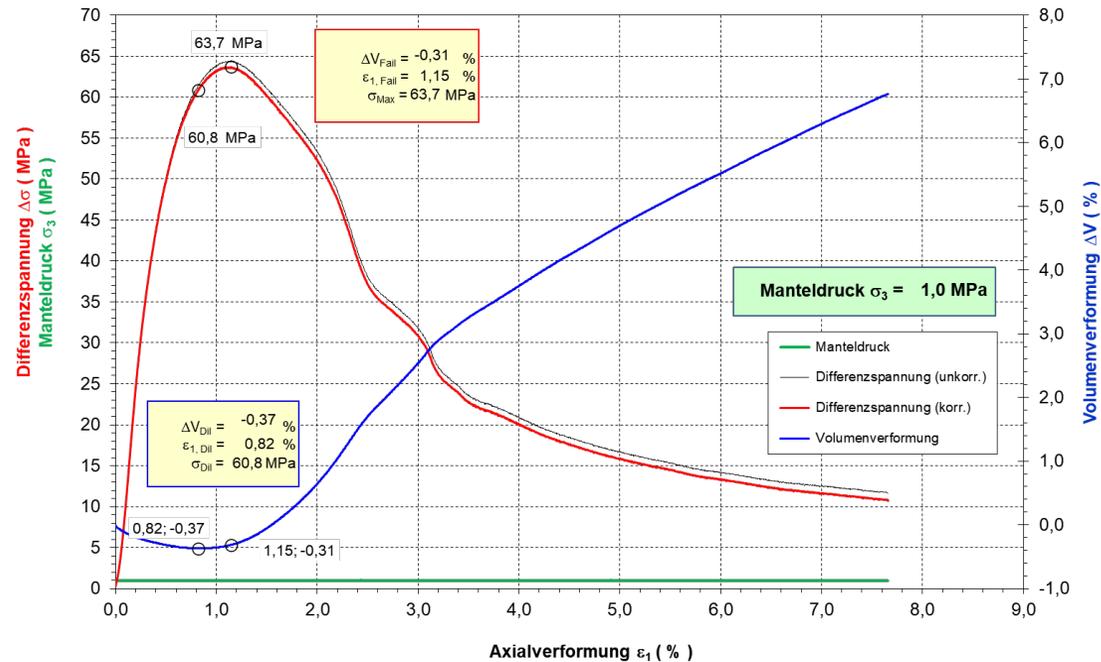
- häufig gemäß: DIN-Normen (12390-3) & Empfehlung Nr.1 des Arbeitskreises „Versuchstechnik Fels“ der Deutschen Gesellschaft für Geotechnik e. V. „Einaxiale Druckversuche an zylindrischen Gesteinsprüfkörpern“
- ausschließlich vertikale Krafteinleitung
- zumeist verformungsgeregelte Versuchsfahrweise, teils mit Lastschleifen
- Lasterhöhung bis zum Bruch bzw. in den Nachbruchbereich
- kontinuierliche Kraft- und Deformationsmessung
- gewonnene Kennwerte: **max. uniaxiale Druckfestigkeit, Bruchdehnung, Längsdehnung, Querdehnung, E-Modul**



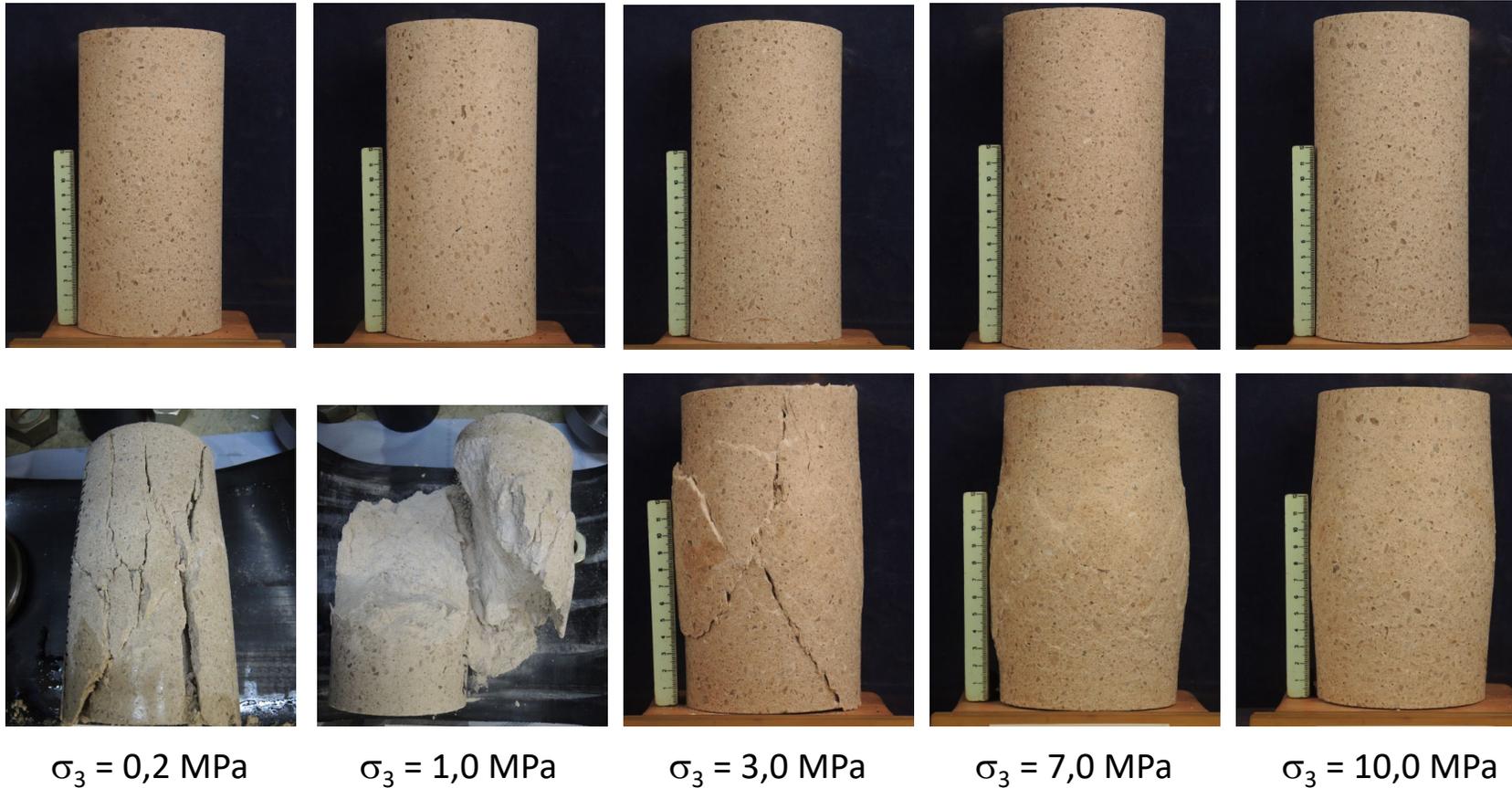


Triaxialer Druckversuch

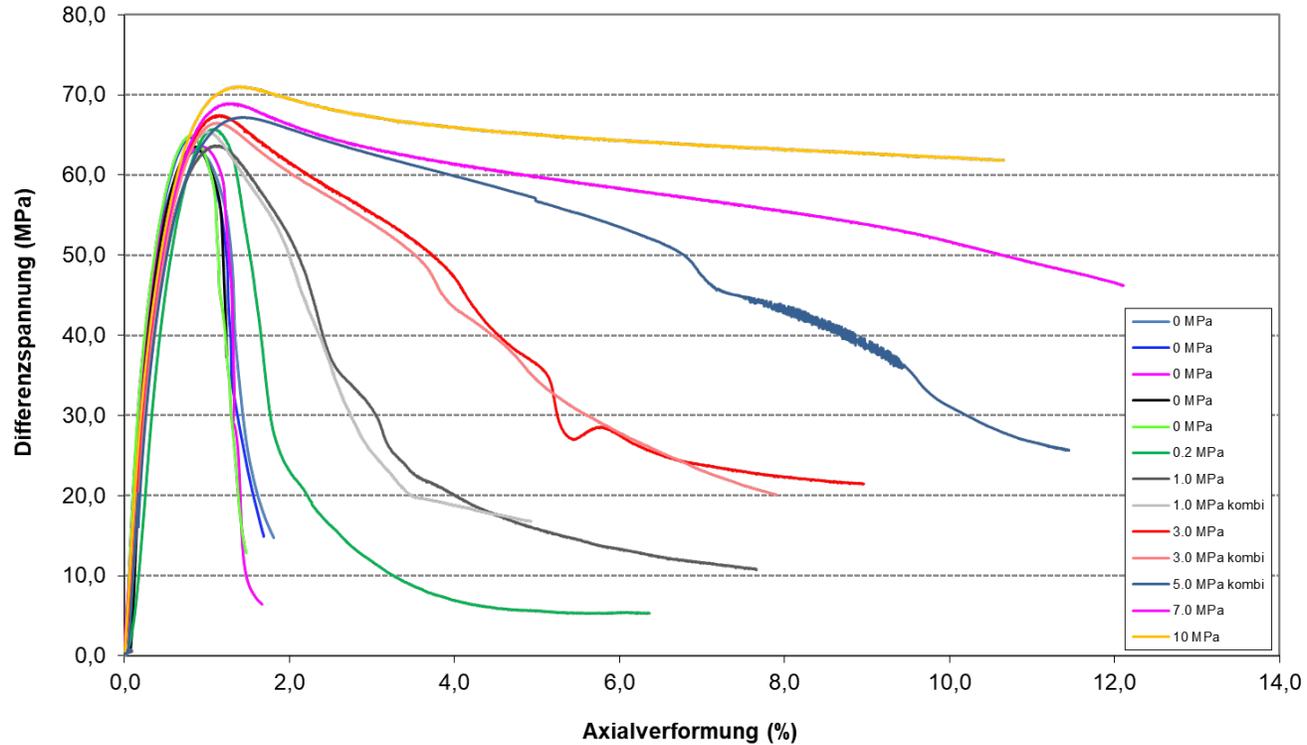
- häufig in Anlehnung an Empfehlung Nr.2 des Arbeitskreises „Versuchstechnik Fels“ der Deutschen Gesellschaft für Geotechnik e. V. „Dreiaxiale Druckversuche an Gesteinsproben“
- vertikale/axiale Krafteinleitung bei wirkendem konstanter Manteldruck (z.B. gemäß wirkender Gebirgsspannung)
- zumeist verformungsregelte Versuchsfahrweise, teils mit Lastschleifen
- auch als Mehrstufenversuch möglich (mit Variation der Manteldruckbedingungen)
- Lasterhöhung bis zum Bruch bzw. in den Nachbruchbereich
- kontinuierliche Kraft- und Deformationsmessung (axial, volumetrisch)
- gewonnene Kennwerte: **max. triaxiale Druckfestigkeit, Dilatanzfestigkeit, Längsdehnung, volumetrische Verformung, Restfestigkeit**



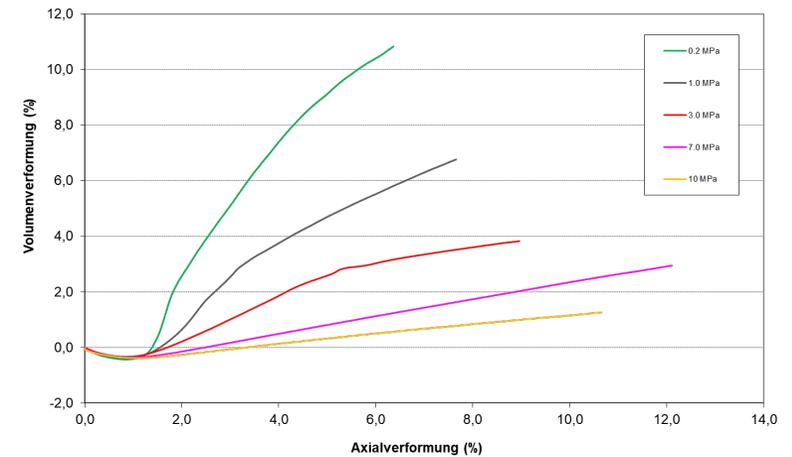
Triaxiale Druckversuche (mit variierten Manteldrücken)



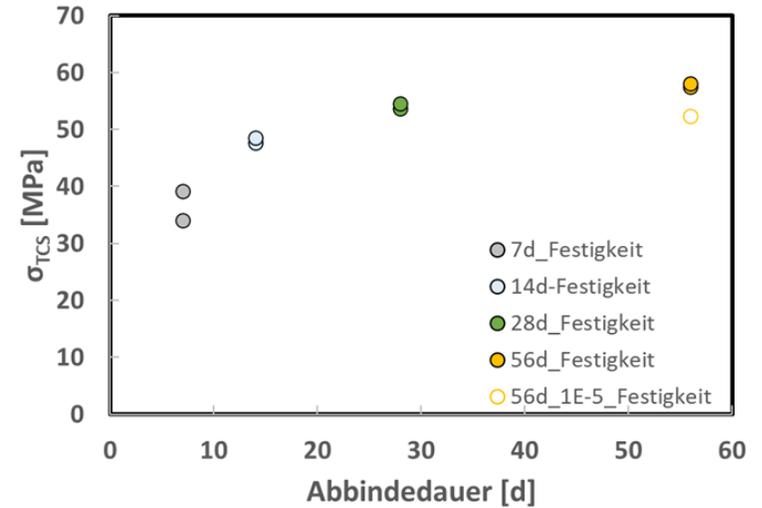
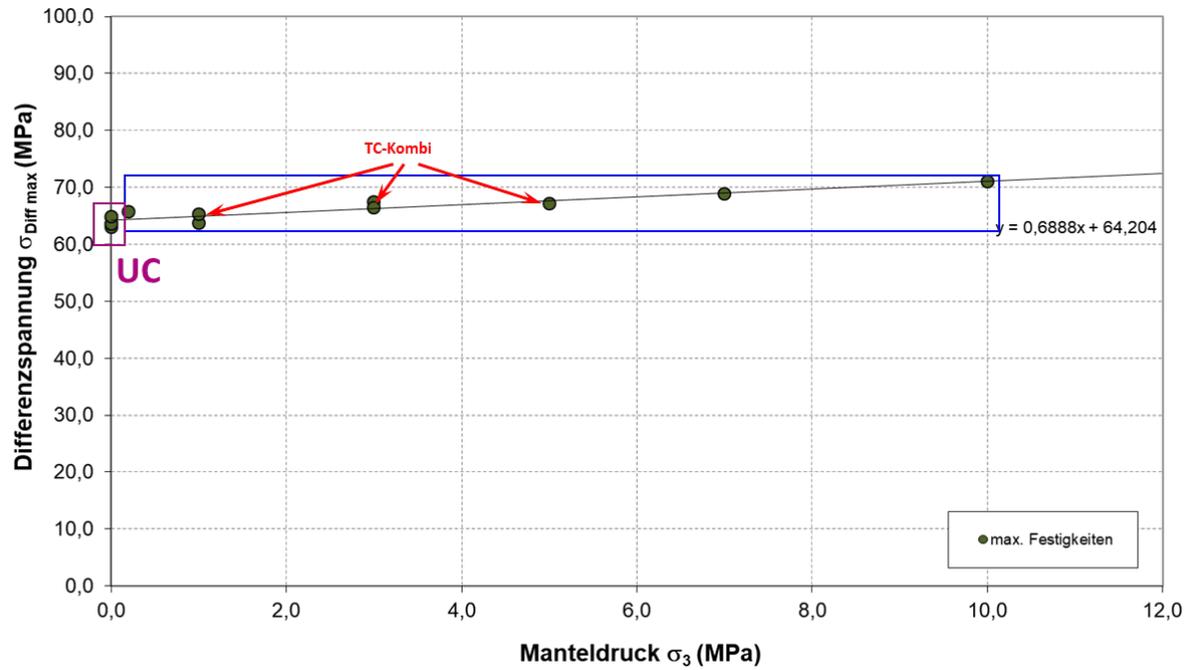
Spannungs-Verformungs-Kennlinien:



Volumenverformung in TC-Versuchen bei $\sigma_3=0,2...10$ MPa:



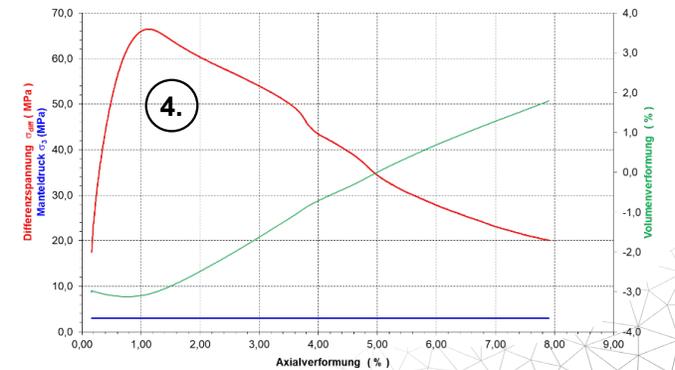
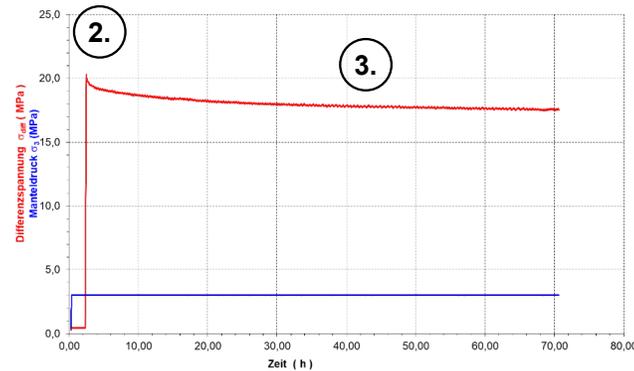
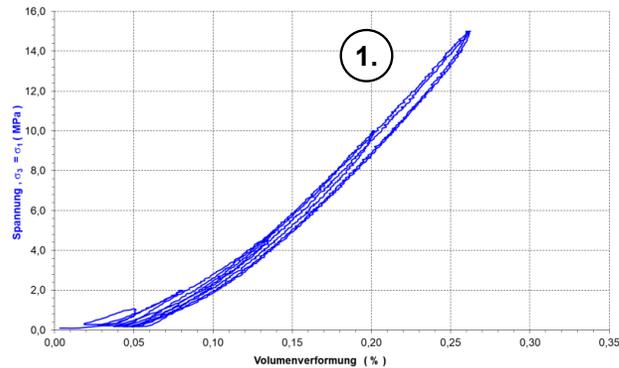
Festigkeiten (in Abhängigkeit vom Manteldruck bzw. vom Abbindealter)



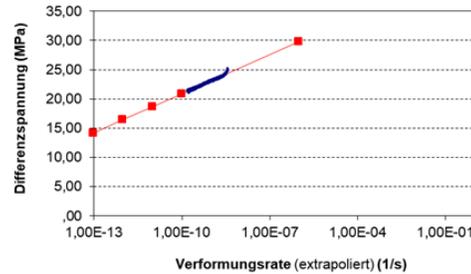
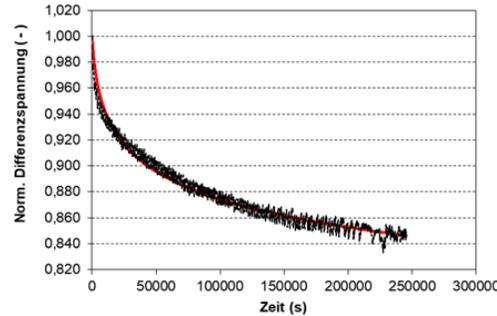
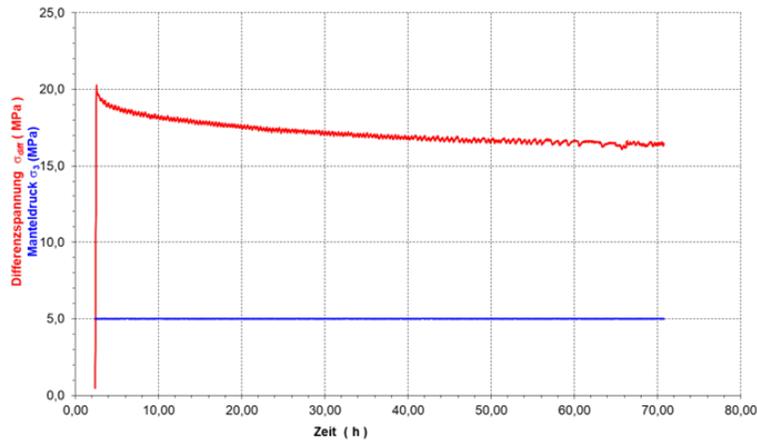
Abbindezeitraum [d]	p_c [MPa]	$\dot{\epsilon}$ [s^{-1}]	σ_{TCS} [MPa]	σ_1 [MPa]
7	1,00	2,50E-05	34,09	35,09
7	2,00	2,50E-05	39,24	41,24
14	1,00	2,50E-05	47,72	48,72
14	2,00	2,50E-05	48,56	50,56
28	1,00	2,50E-05	53,77	54,77
28	2,00	2,50E-05	54,65	56,65
56	1,00	2,50E-05	57,45	58,45
56	2,00	2,50E-05	58,09	60,09
56	2,00	1,00E-05	52,41	54,41

→ bestehend aus einer Kombination von:

1. Isotroper Versuch bei $\sigma_1 = \sigma_3 = 1/2/5/10/15$ MPa
2. Deviatorische Belastung bis 30% von $\sigma_{1,max}$ aus UC-/TC-Versuchen
3. Deviatorische Relaxation bei $\sigma_3 = 1/3$ oder 5 MPa
4. Deviatorische Belastung bis max. Festigkeit und Nachbruchbereich

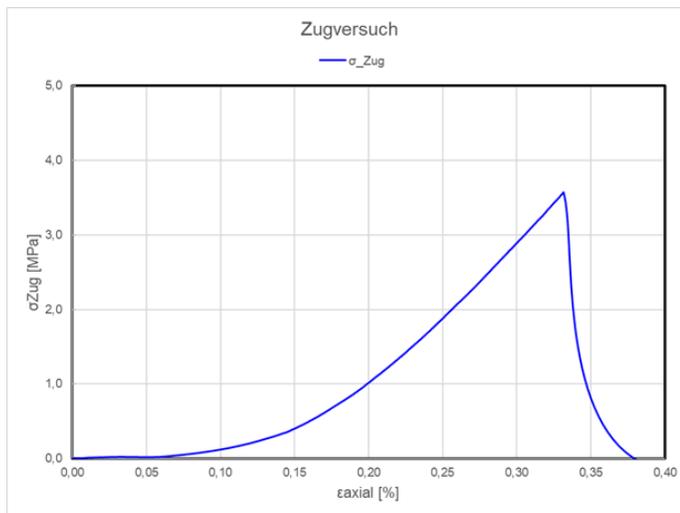


- vertikale/axiale Krafteinleitung bei wirkendem konstanter Manteldruck (z.B. gemäß wirkender Gebirgsspannung)
- Anfahren einer Zielspannung (z.B. 30% der Bruchspannung)
- Anhalten der Axialstauchung
- -> führt zum Spannungsabbau (durch zeitabhängige Deformations- und Ausgleichprozesse im Gefüge)
- kontinuierliche Kraft- und Deformationsmessung
- gewonnene Kennwerte: **langzeitlicher Widerstand (Tragwiderstand) bei in-situ (Kriech-)Raten**

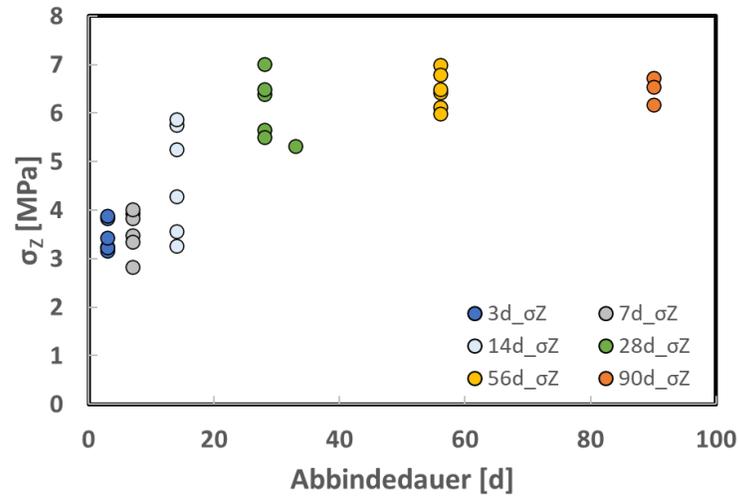


Kriechrate (1/s)	Extrapol. Spannung (MPa)
1,00E-06	29,82
1,00E-10	20,90
1,00E-11	18,67
1,00E-12	16,44
1,00E-13	14,21

- vertikale/axiale Krafteinleitung (über aufgeklebte Stempelplatten an den Endflächen)
- Lasterhöhung bis zum Bruch / Zugversagen
- kontinuierliche Kraft- und Deformationsmessung
- gewonnene Kennwerte: max. Zugfestigkeit, Längsdehnung



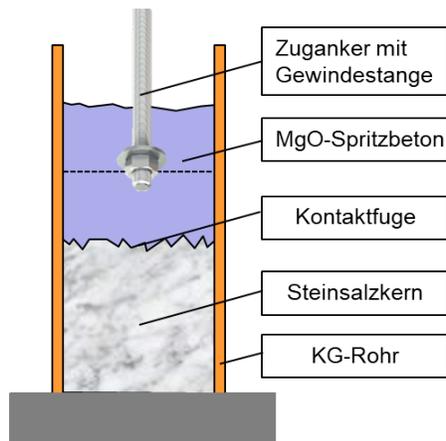
Zugfestigkeiten (in Abhängigkeit vom Abbindealter)

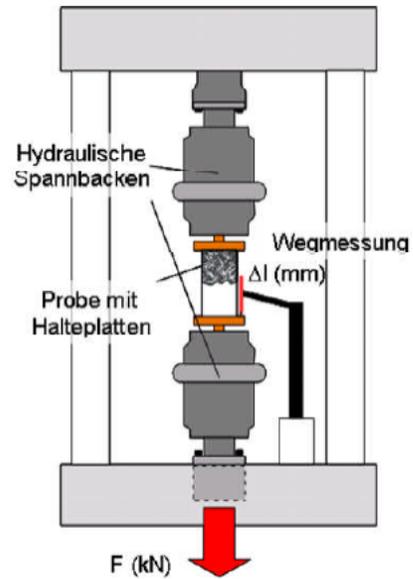


Abbindezeit raum	σ_{Zug} [MPa]
3	3,17
3	3,25
3	3,24
3	3,83
3	3,43
3	3,88
7	2,83
7	3,94
7	3,49
7	3,35
7	3,84
7	4,02
14	3,57
14	5,75
14	5,87
14	5,25
14	3,27
14	4,29

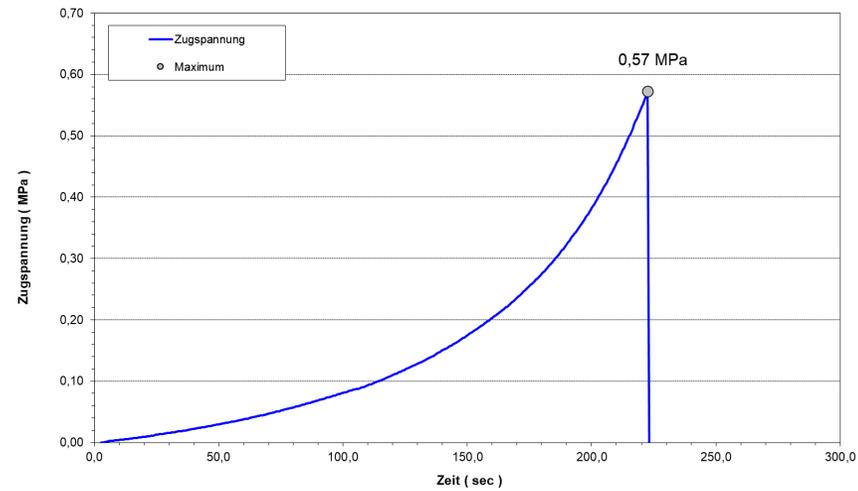
Abbindezeit raum	σ_{Zug} [MPa]
28	7,01
28	6,40
28	6,49
28	5,66
28	5,51
33	5,32
56	6,43
56	6,50
56	6,12
56	5,99
56	7,00
56	6,79
90	6,17
90	6,72
90	6,55

- äquivalent zum Zugversuch (an reinen Baustoffproben) aber mit Fokus auf Kontakt (-fläche) Baustoff + Gestein (z.B. Steinsalz, Carnallit etc.)
- vertikale/axiale Krafteinleitung (über aufgeklebte Stempelplatten an den Endflächen oder durch einbetonierte Zugstangen)
- Lasterhöhung bis zum Bruch / Zugversagen
- kontinuierliche Kraft- und Deformationsmessung
- gewonnene Kennwerte: **max. Zugfestigkeit, Längsdehnung**

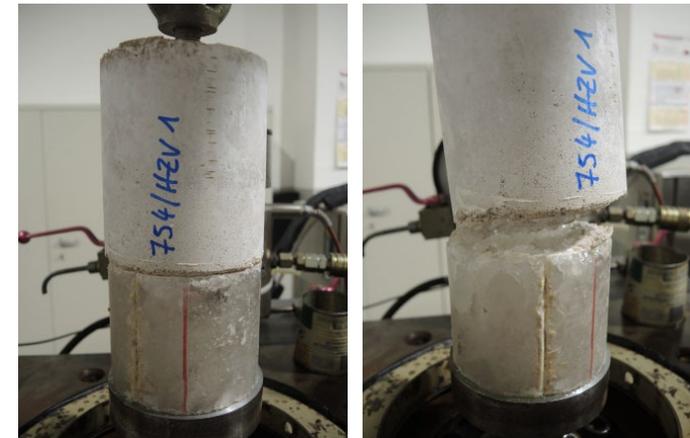




a)



b)

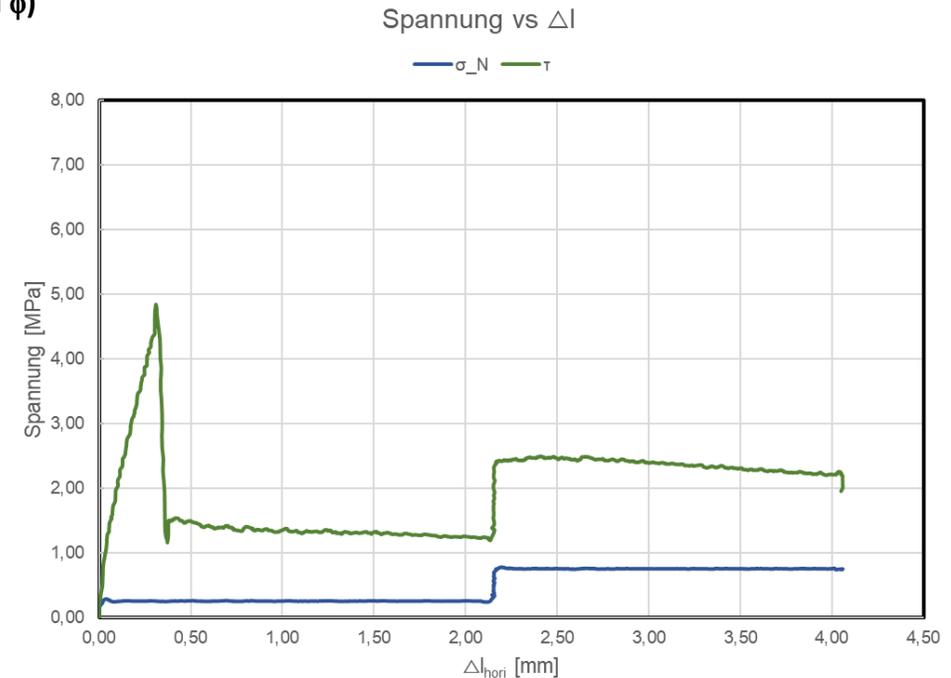


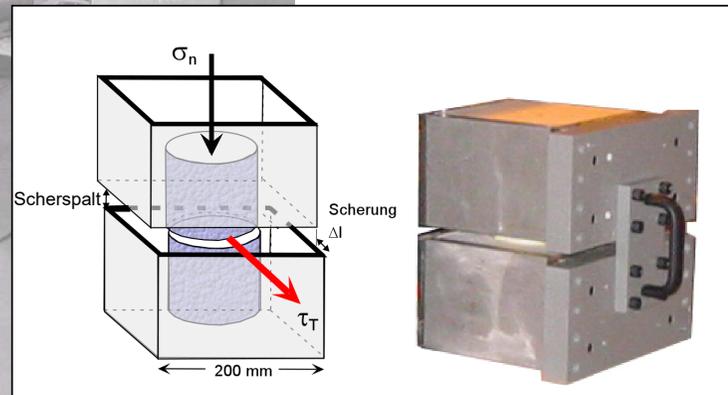
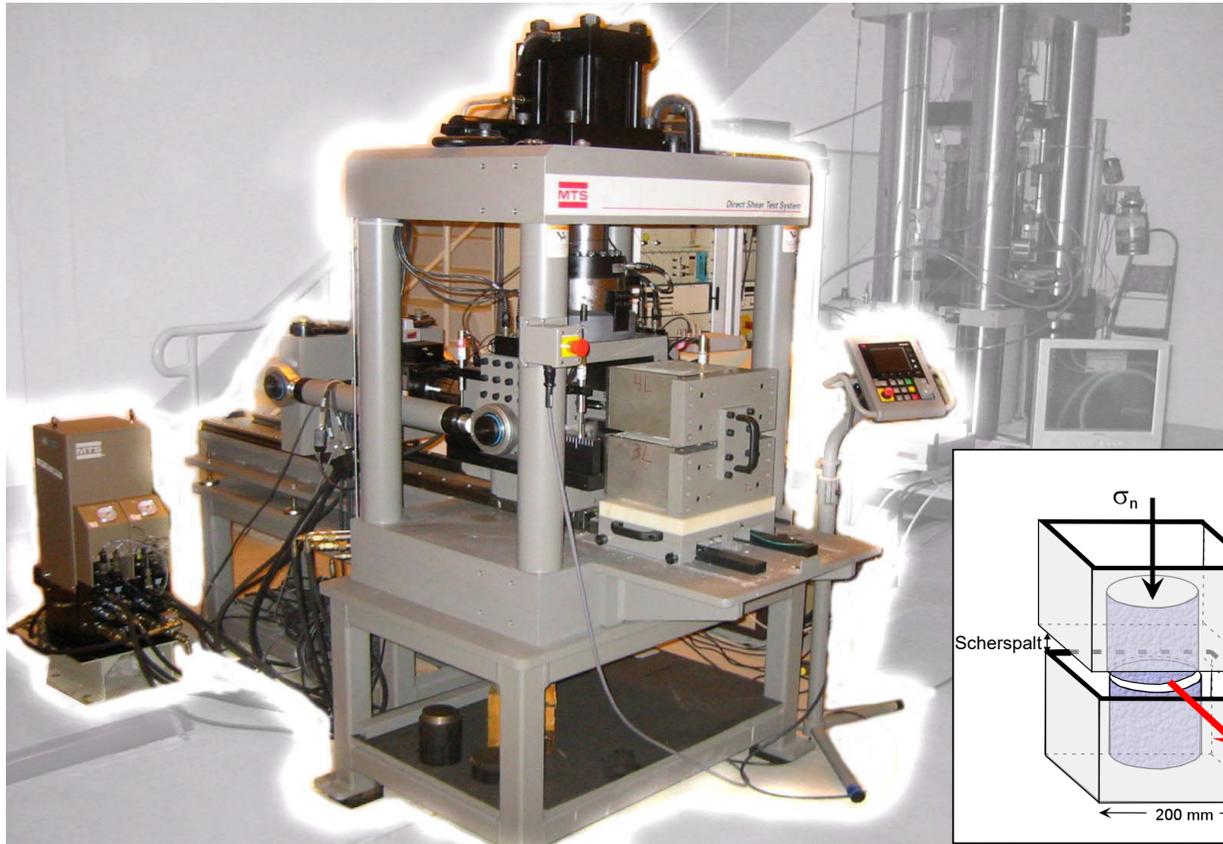
Vor dem Bruch

Nach dem Bruch

c)

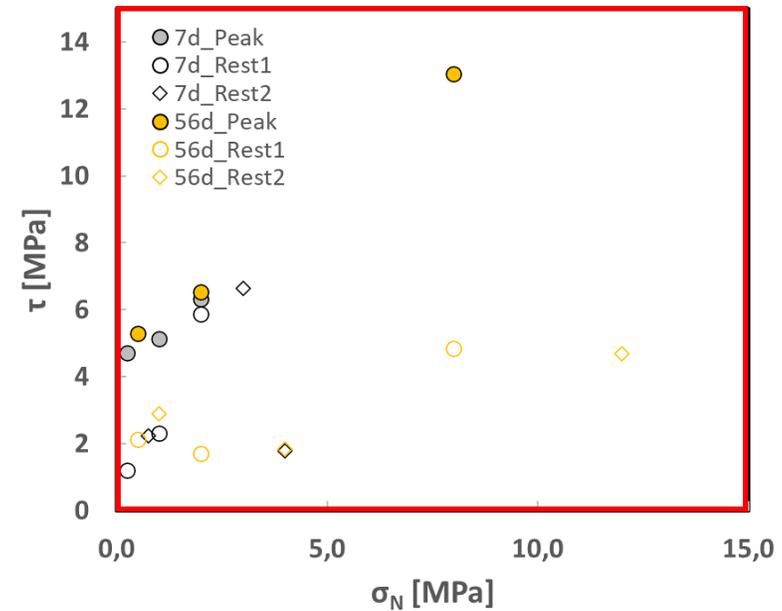
- vertikale & horizontale Krafteinleitung
- Schubspannungserhöhung (bei konstanter Normalspannung) bis zum Bruch / Scherversagen
- auch in Mehrstufentechnik möglich (Variation der Normalspannung) zur Ermittlung weiterer Restfestigkeit
- kontinuierliche Kraft- und Deformationsmessung
- gewonnene Kennwerte: **max. Scherfestigkeit, Restscherfestigkeit, Axialstauchung, Scherverschiebung**
- **Ableitung von MOHR-COULOMB-Parametern (Kohäsion c und Reibungswinkel ϕ)**





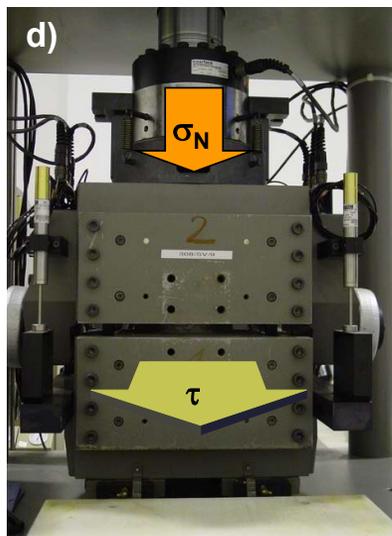
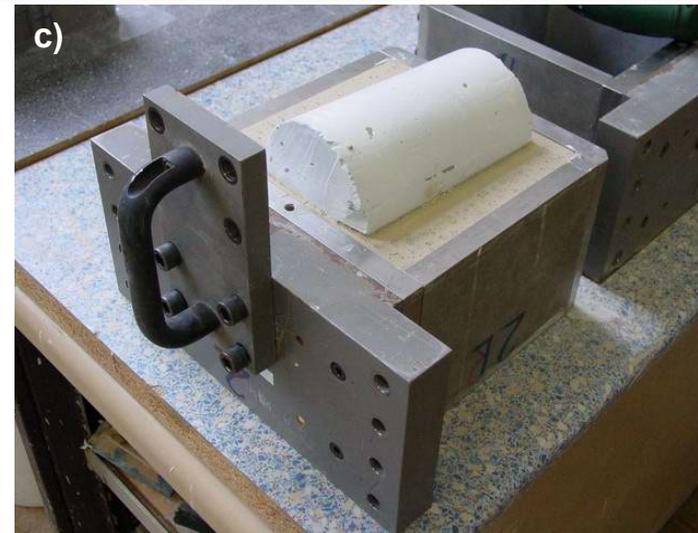
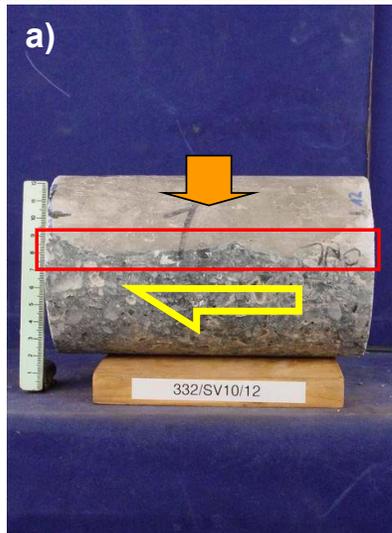
Scherfestigkeiten (in Abhängigkeit vom Abbindealter)

Abbindezeitraum	I-Rate	σ_{N1}	σ_{N2}	T_{Peak1}	T_{Res1}	T_{Res2}
[d]	[mm/s]	[MPa]	[MPa]	[MPa]	[MPa]	[MPa]
7	0,002	0,25	0,75	4,71	1,19	2,24
7	0,002	1,00	3,00	5,13	2,30	6,63
7	0,002	2,00	4,00	6,33	5,87	1,78
56	0,002	0,50	1,00	5,30	2,12	2,90
56	0,002	2,00	4,00	6,53	1,71	1,85
56	0,002	8,00	12,00	13,05	4,85	4,68

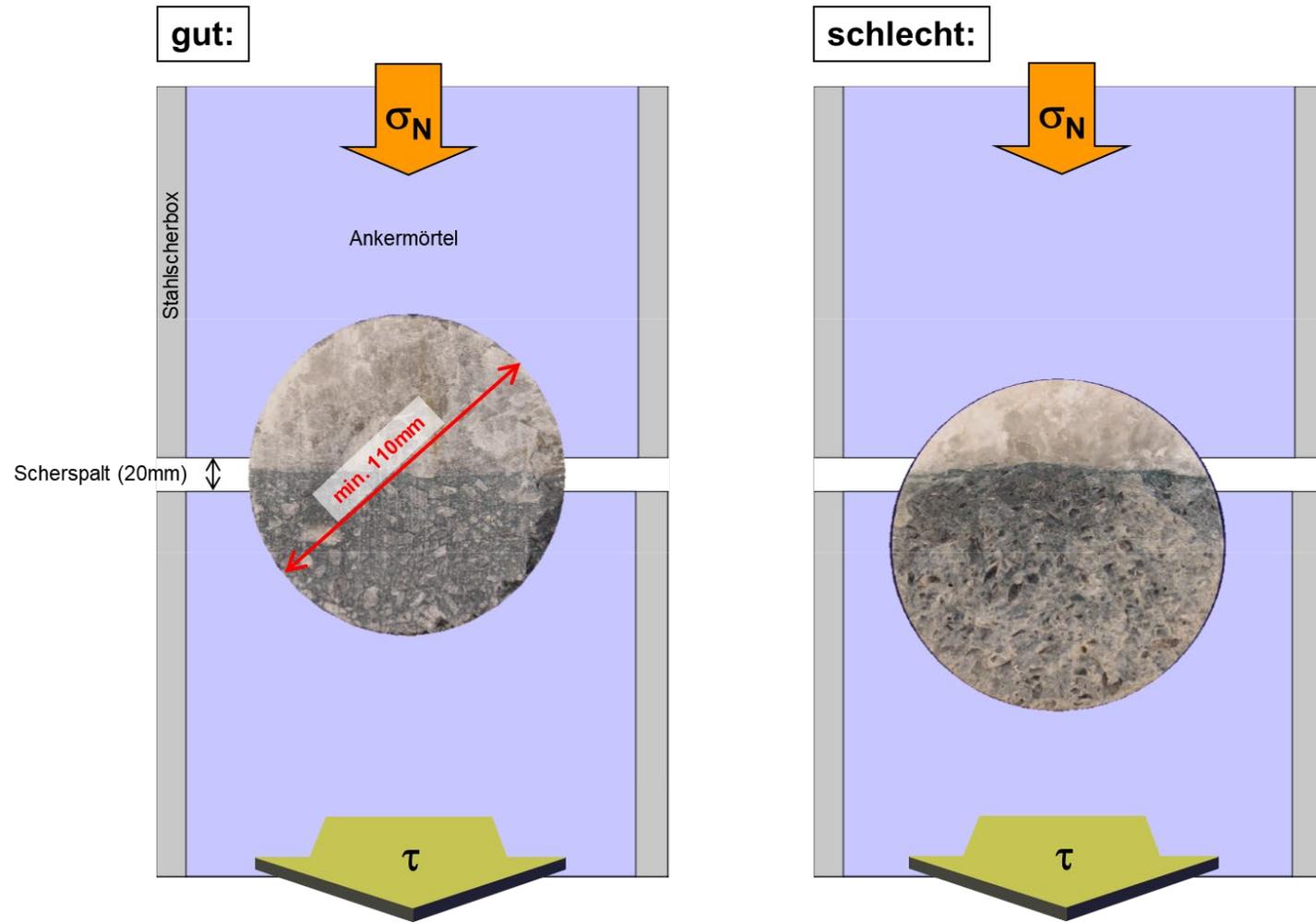


- äquivalent zum direkten Scherversuch (an reinen Baustoffproben) aber mit Fokus auf Kontakt (-fläche) Baustoff + Gestein (z.B. Steinsalz, Carnallit etc.)
- vertikale & horizontale Krafteinleitung
- Schubspannungserhöhung (bei konstanter Normalspannung) bis zum Bruch / Scherversagen
- auch in Mehrstufentechnik möglich (Variation der Normalspannung) zur Ermittlung weiterer Restfestigkeit
- kontinuierliche Kraft- und Deformationsmessung
- gewonnene Kennwerte: **max. Scherfestigkeit, Restscherfestigkeit, Axialstauchung, Scherverschiebung**
- **Ableitung von MOHR-COULOMB-Parametern (Kohäsion c und Reibungswinkel ϕ)**

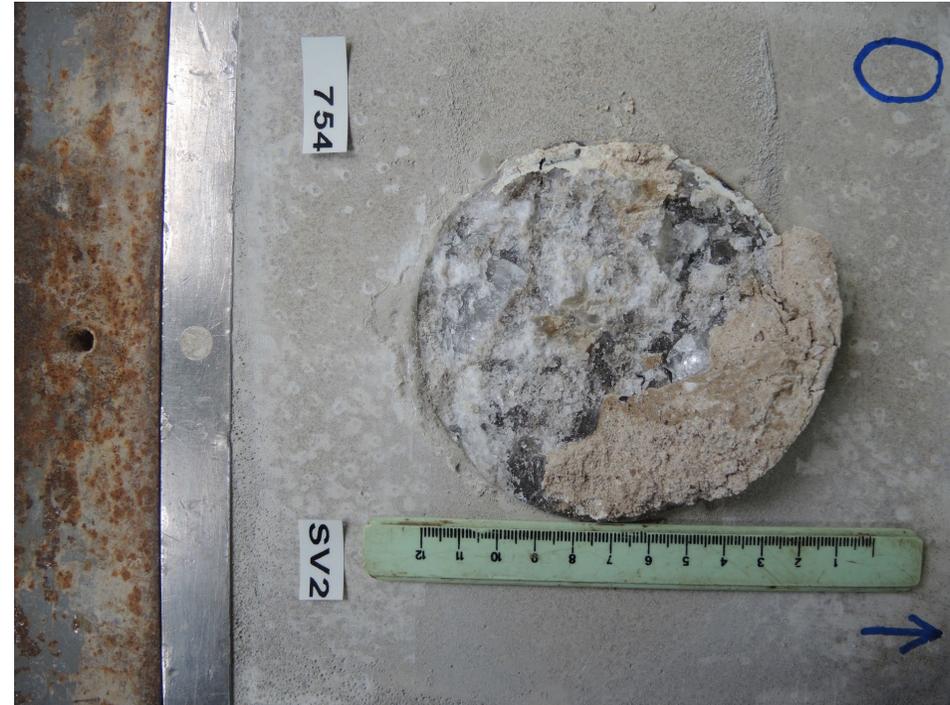
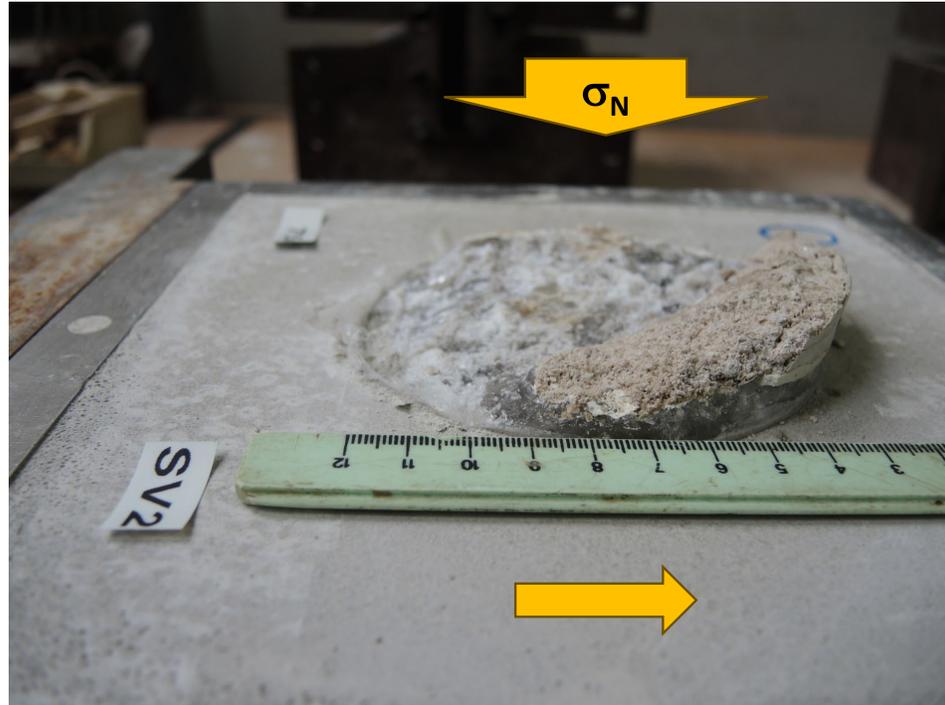




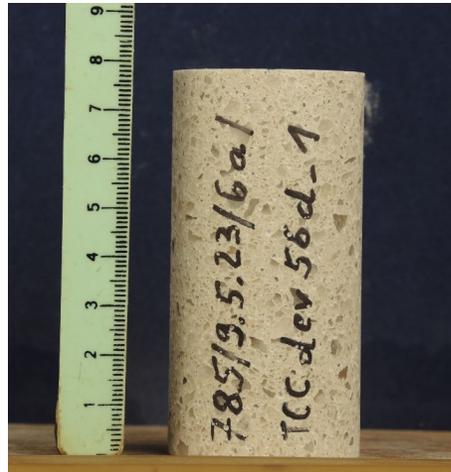
- a) Kontaktfläche in horizontaler Ansicht
- b) Kontaktfläche an Stirnseite der Probe
- c) vorbereitete und in Unterkasten der Scherbox eingegossene Probe
- d) in Schergerät eingebaute Probe während des Versuches (vertikal: Aufbringen der Normallast und horizontal: Verschiebung)

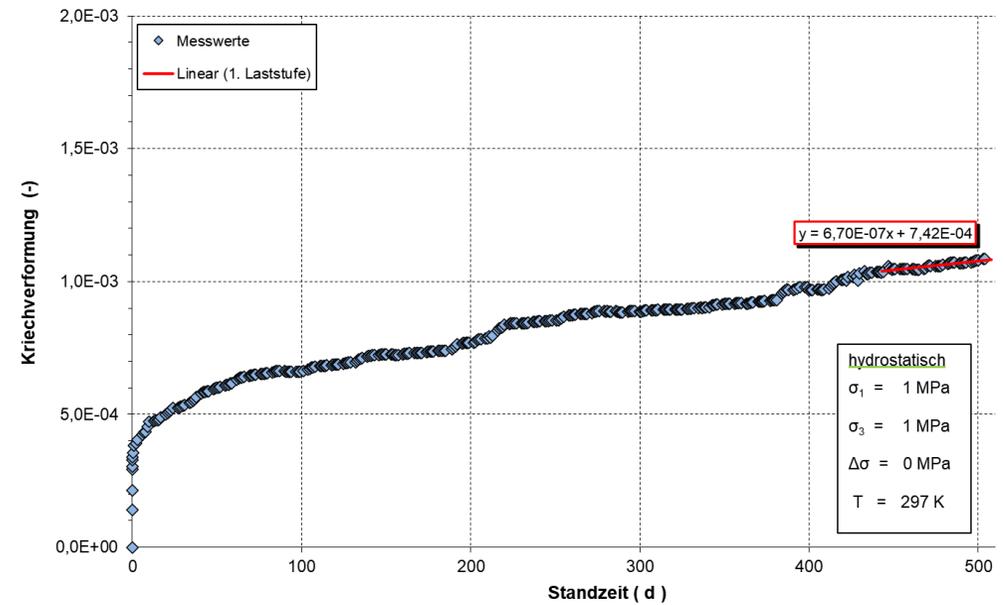
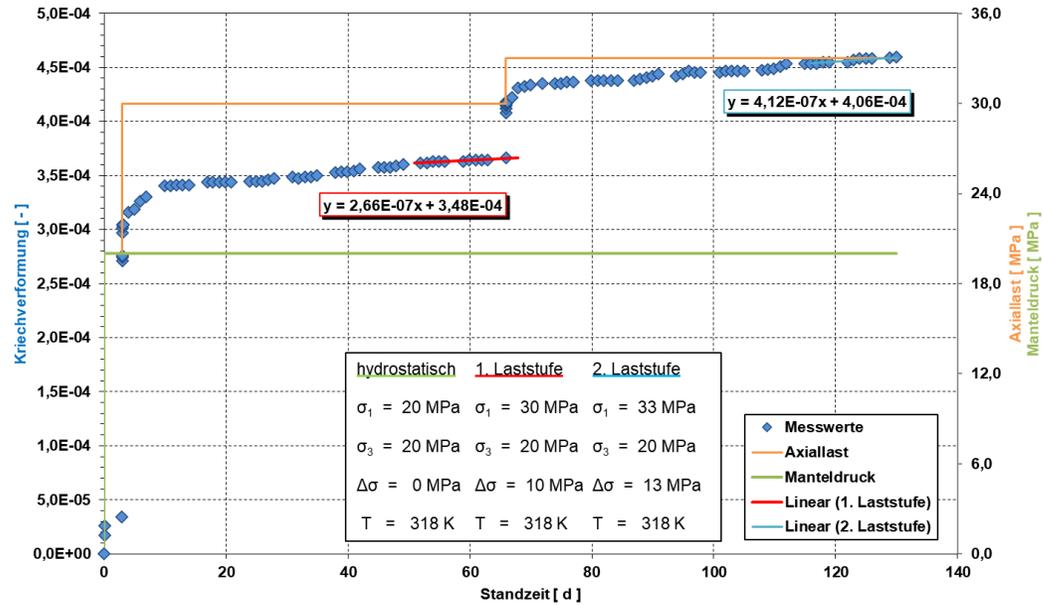


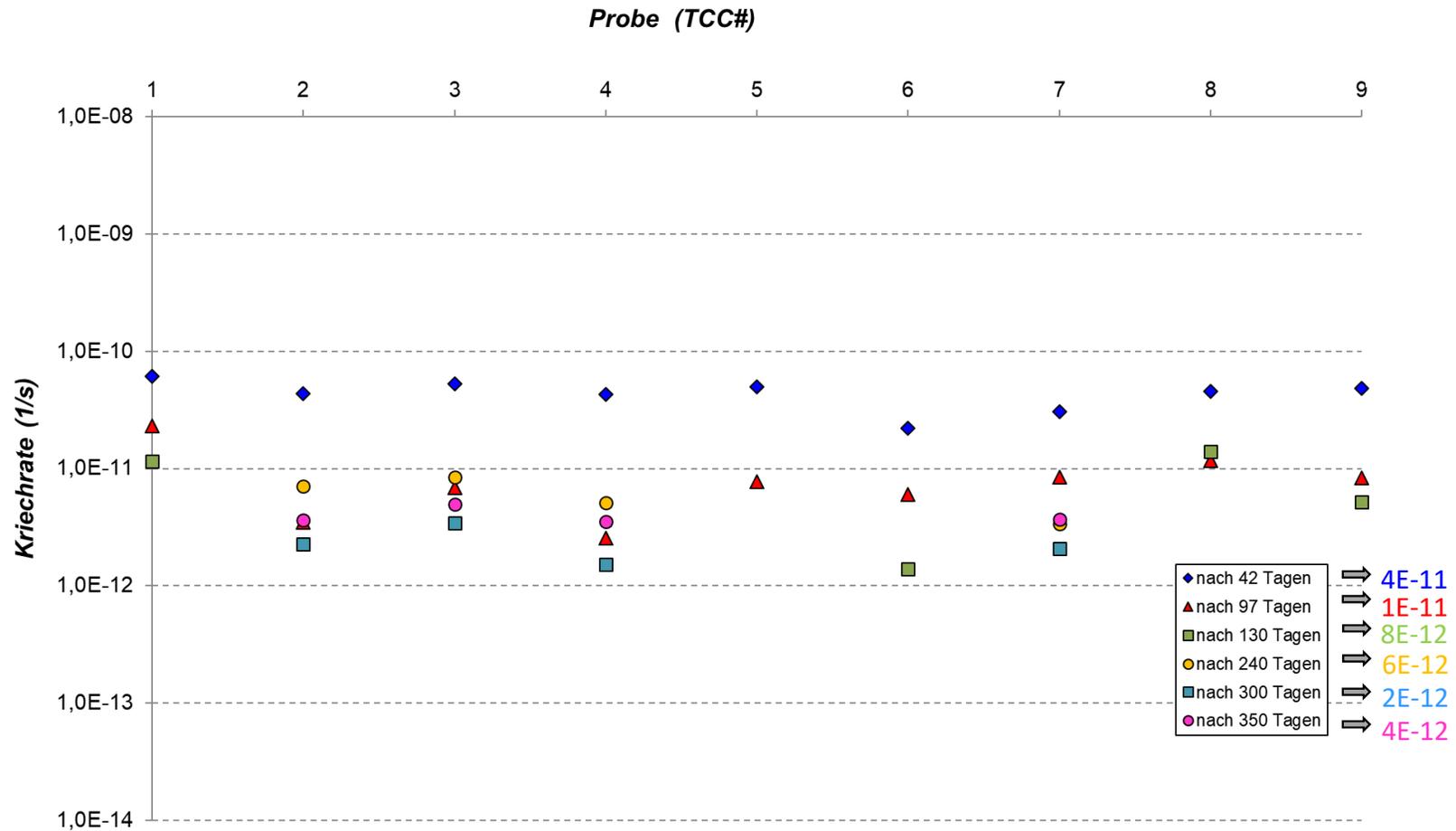
Direkter Scherversuch (an Kontaktflächen)



- Versuchsaufbau ähnlich einem triaxialen Festigkeitsversuch
- **konstante** vertikale/axiale Belastung bei wirkendem konstanter Manteldruck
- isotrope Spannungsbedingungen oder deviatorische Belastung
- auch als Mehrstufenversuch möglich (mit Variation der Spannungsbedingungen oder der Temperaturbedingungen)
- Ziel: Erreichen stationärer Bedingungen
- kontinuierliche Kraft- und Deformationsmessung
- gewonnene Kennwerte: **Ableitung von Kriechraten, Erfassung der Kriechverformung -> zeitabhängiges Verformungsverhalten**







- Mechanische Laboruntersuchungen:

- liefern für eine rechtechnische Nachweisführung zwingend erforderliche Parameter
- ermöglichen Eigenschaftbestimmungen von Baustoffen **VOR** dem Einbau & **NACH** dem Einbau
- sind notwendig aus Sicht der Qualitätssicherung
- dienen ebenso der Rezepturenentwicklung /-weiterentwicklung /-änderung



- sind letztlich aber ein Puzzleteil im Gesamtbild „Verschlussbaustoff“



Vielen Dank für Ihre
Aufmerksamkeit



GLÜCKAUF!



Hydraulische Versuchstechniken zur Charakterisierung von Verschlussbaustoffen

E. Jahns¹* und T. Popp²

¹ GL Test Systems GmbH, Heiligenstadt, Deutschland
Email: jahns@gl-testsystems.com

² Institut für Gebirgsmechanik, Leipzig, Deutschland
Email: till.popp@ifg-leipzig.de

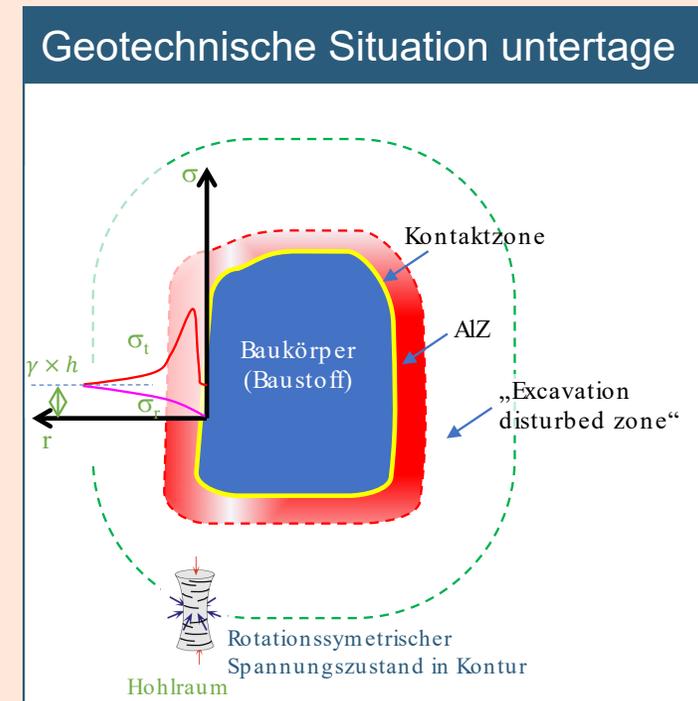
481

Agenda

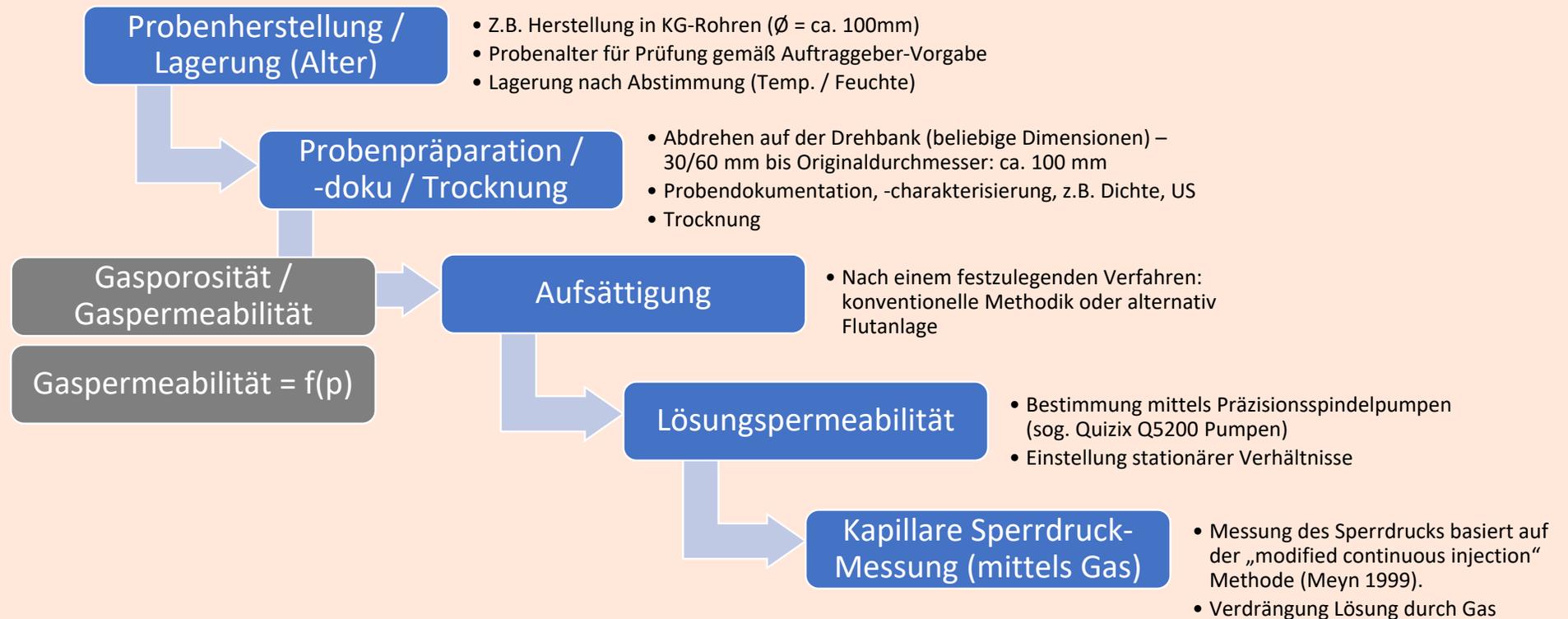
1. Motivation
2. Vorgehensweise hydraulische Laboruntersuchungen
3. Probenvorbereitung
4. Stationäre Permeabilitätsmessung mit Gas und Lösung
5. Kapillarer Sperrdruck
6. Zusammenfassung

Motivation

- Eine Langzeitsicherheitsanalyse von Verschlussbauwerken verlangt die Kenntnis der hydraulischen Eigenschaften der verwendeten Materialien bzw. Kontaktbereiche:
 - Baustoffe
 - Kontakt- / Auflockerungszone Gebirge
- Vorgestellt werden Empfehlungen für Probenbehandlung und Durchführung der Messverfahren



Fließschema Hydraulische Untersuchungen



Probenpräparation

Salzhaltiges Probenmaterial

- Mechanische Bearbeitung mit Trennmaschine und Drehbank
- Ohne Zusatz von Bohrspülung, also „trocken“



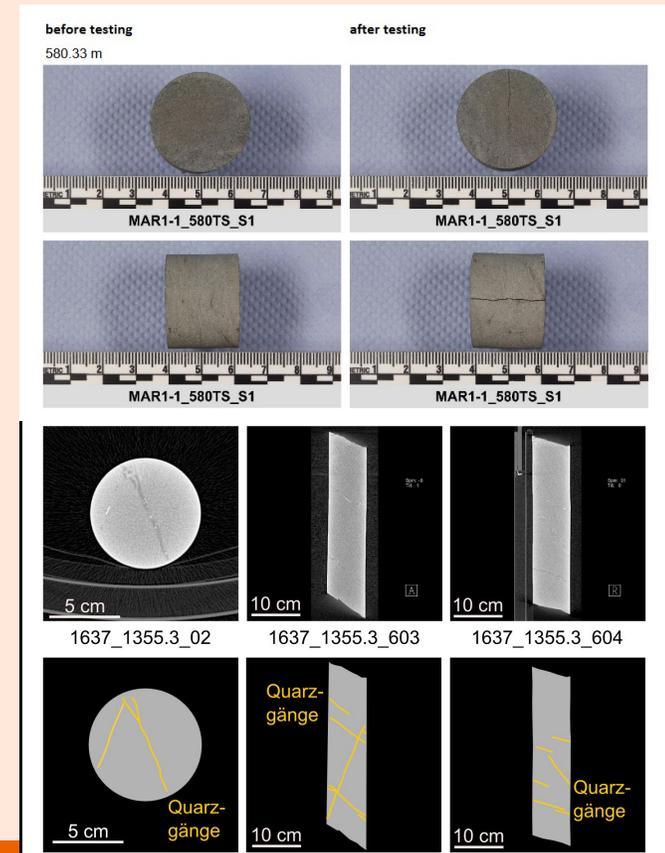
Tonhaltiges Probenmaterial

- Mechanische Bearbeitung mit Kernbohrmaschine und Trennmaschine
- Mineralisches Öl als Bohrspülung



Probencharakterisierung

- Beschriftung mit eindeutiger Kennzeichnung
- Fotografische Aufnahme der Prüfkörper von verschiedenen Seiten
- Bestimmung der geometrischen Abmessungen
- Wägung der Probe, Berechnung der Rohdichte (DIN EN 1936)
- Ggfls. Integritätsnachweis mit Ultraschallmessungen oder/und CT-Scan



Konditionierung und Porosität – trockene Proben

Trocknung zur Bestimmung von Sättigungszustand und offener Porosität
aber wie, ohne die Probe zu schädigen?

Zu beachten: Vakuumversuche an hydratisierten Binder- oder Salzmineralphasen (z.B. Carnallit) können durch das Absenken des Wasserdampfpartialdrucks zu einer kinetisch kontrollierten Zersetzung der Hydrate führen.

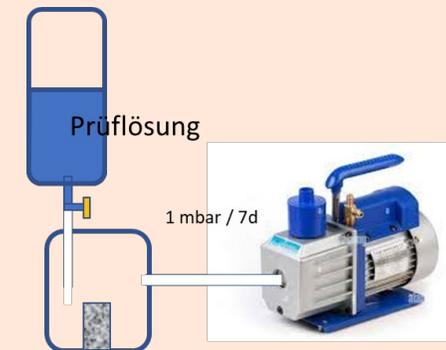
Es steht keine Norm oder Empfehlung für die Trocknung Hydrat -haltiger Proben zur Verfügung. Mögliche Verfahren sind:

- Trocknung im Vakuumofen bei etwa 40 °C
- Trocknung bei 45 °C und einer vorgegebenen Luftfeuchtigkeit von z. B. 35% relativer Feuchte.
- Bestimmung der Porosität nach Standardverfahren mit Pyknometer

Konditionierung und Porosität – gesättigte Proben

Bestimmung von hydraulischen Kennwerten an gesättigten Probekörpern
aber wie wird gewährleistet, dass vollständige Sättigung vorliegt ?

- Üblich:
Evakuierung der Probe und anschließend vollständige Benetzung mit der Lösung.
 - Zu beachten: Abhängig von der zugänglichen Porosität bzw. der vorliegenden Permeabilität der Probe wird allenfalls eine Teilsättigung (z.B. in der Randbereichen) erreicht.
 - Besser: zusätzliche Aufsättigung der Probe im Durchströmungsversuch in der Flutanlage (In-flow = Out-flow), aber immer noch Teilsättigung?
- Bestimmung der Porosität aus Wägungen trocken / gesättigt



Permeabilität - Methodik

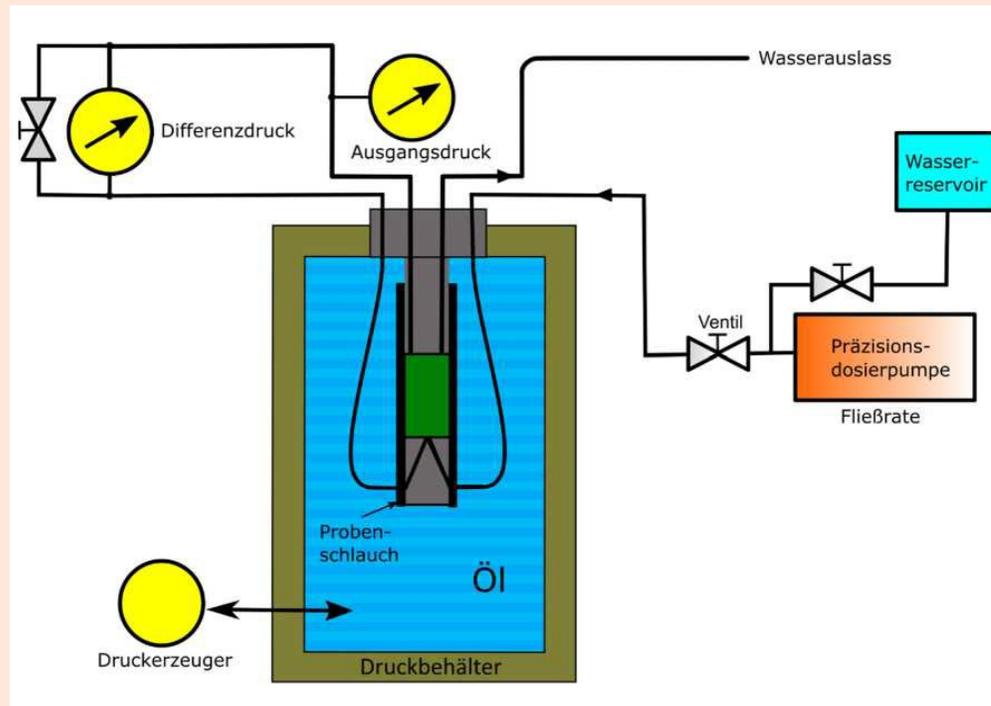
Instationär

- Keine Fließratenmessung notwendig
- Kompressibilität des Messfluids muss bekannt sein
- Druckverteilung im Probekörper zeitlich veränderlich – Sacklochporen beeinflussen Messung

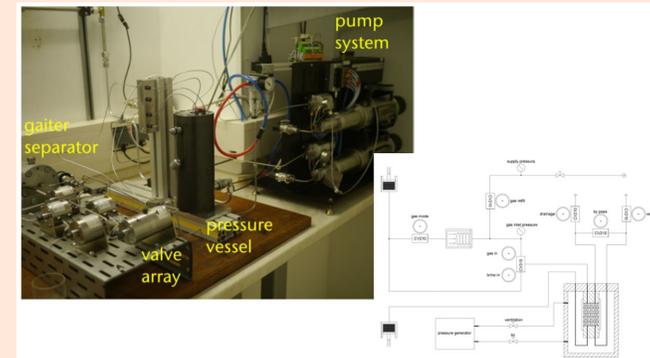
Stationär

- Bestimmung der effektiven Porosität nicht notwendig
- Druckverteilung im Probekörper zeitlich unveränderlich
- Entspricht den in-situ Bedingungen
- Anforderung vollständige Sättigung!

Prüfstand Aufsättigung

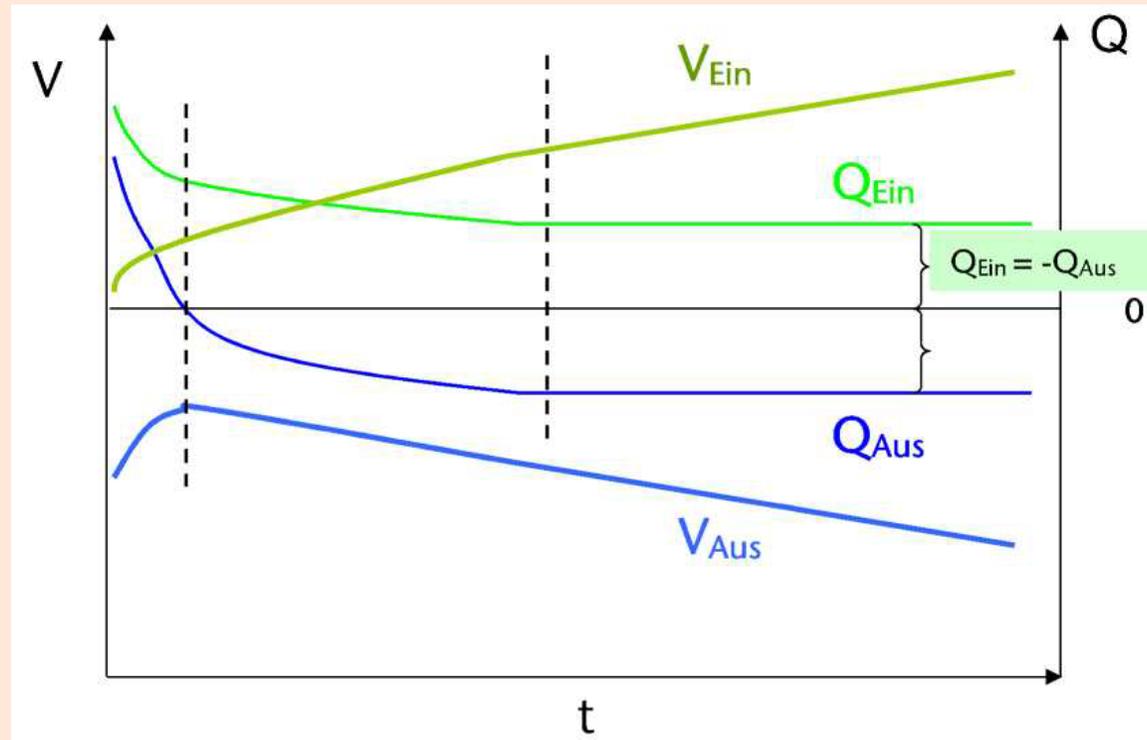


Schema eines Prüfstands zur Sättigung einer Probe unter äußerer Einspannung und ggfls. Messung der Lösungspermeabilität gegen Atmosphäre



- Messaufbau Labor

Stationäre Permeabilitätsmessung



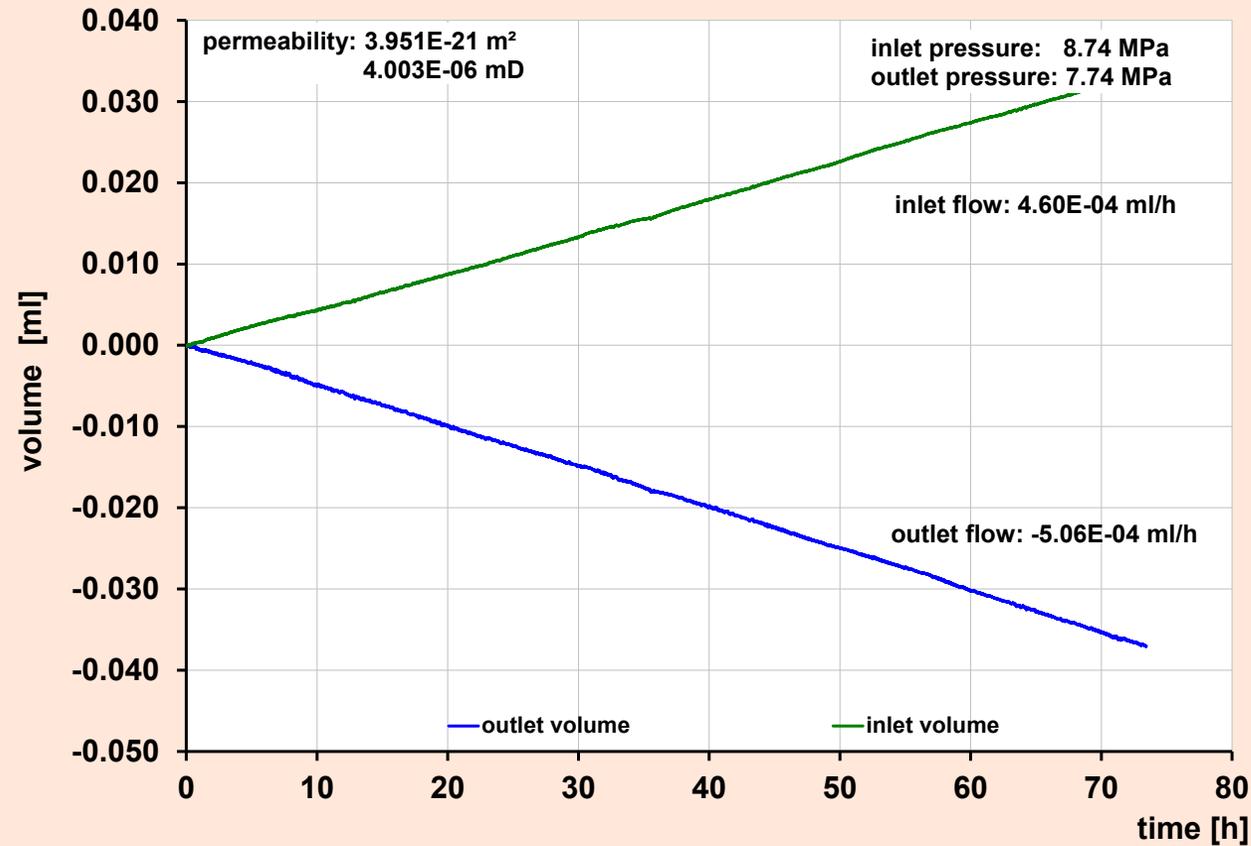
Q: Durchflussrate

V: Lösungsvolumen

t: Zeit

Zeitlicher Verlauf einer Permeabilitätsmessung

Permeabilität an einem Tonstein



DARCY-Gleichung für laminare Strömung einer Flüssigkeit:

$$k = \frac{q \cdot \eta \cdot l}{A(p_1 - p_2)}$$

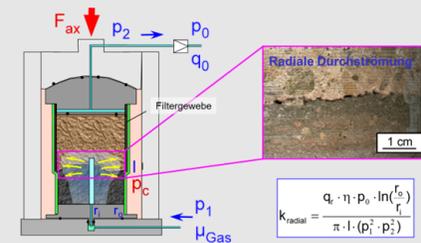
Modifizierte DARCY-Gleichung für Strömung mit Gas:

$$k = \frac{2 \cdot p_0 \cdot q_0 \cdot \eta \cdot l}{A(p_1^2 - p_2^2)}$$

Permeabilität an Kontaktzone

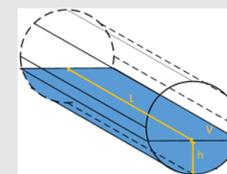
- Probenmaterial aus der Kontaktzone zwischen Gebirge und Bauwerk steht oft in Bohrkernen zur Verfügung, die senkrecht zur Kontaktzone erbohrt wurden.
- Auch bei im Labor synthetisch hergestellten Proben stellt sich üblicherweise diese Geometrie ein.
- Soll die Permeabilität entlang der Kontaktzone bestimmt werden, wird dies im Allgemeinen nur in Versuchen mit radialer Durchströmung gelingen

Option 1: radiale Durchströmung Kontaktfläche



- ☺ Erprobtes Standardverfahren (bis $\varnothing \geq 50$ mm)
- ☺ Haftzugfestigkeit als QM-Parameter messbar

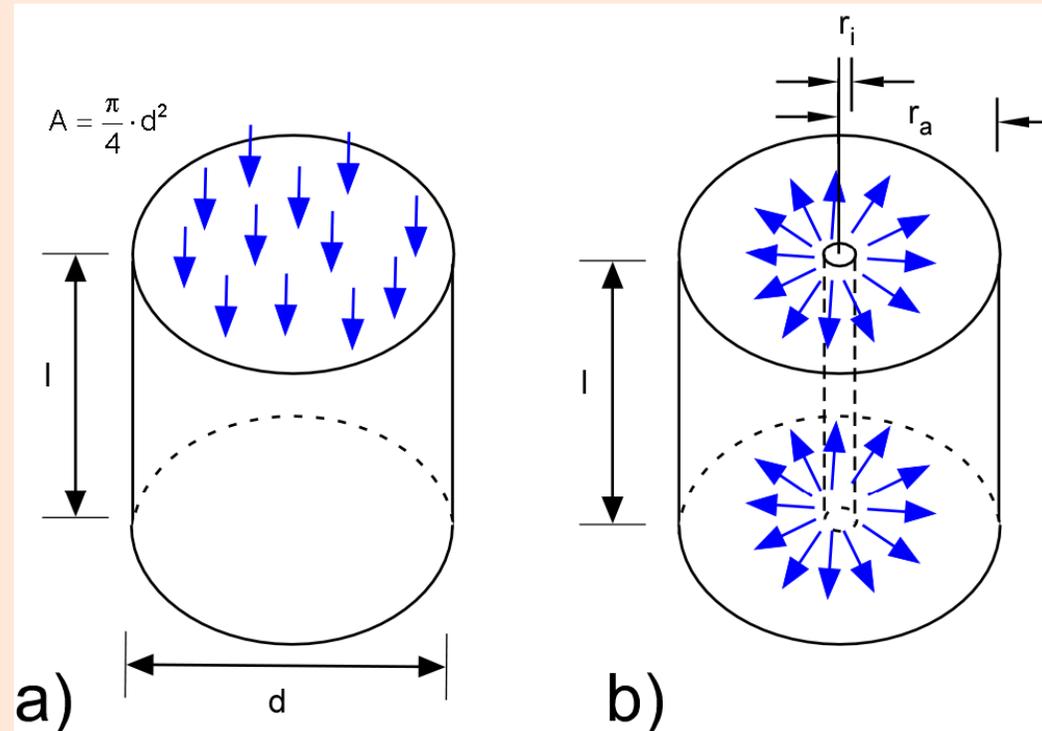
Option 2: axiale Durchströmung Halbzylinder



- ☺ Technisch möglich
- ☺ Geometrisch einfachere Strömungssituation
- ☹ Keine Erfahrungen zur praktischen Herstellung
- ☹ Anbindung Baustoff / Gebirge ist qualitativ

Strömungsgeometrie zylindrischer Proben

a) axial: Einleitung des Messfluids über die Stirnfläche mit Ausbreitung entlang der Zylinderachse.

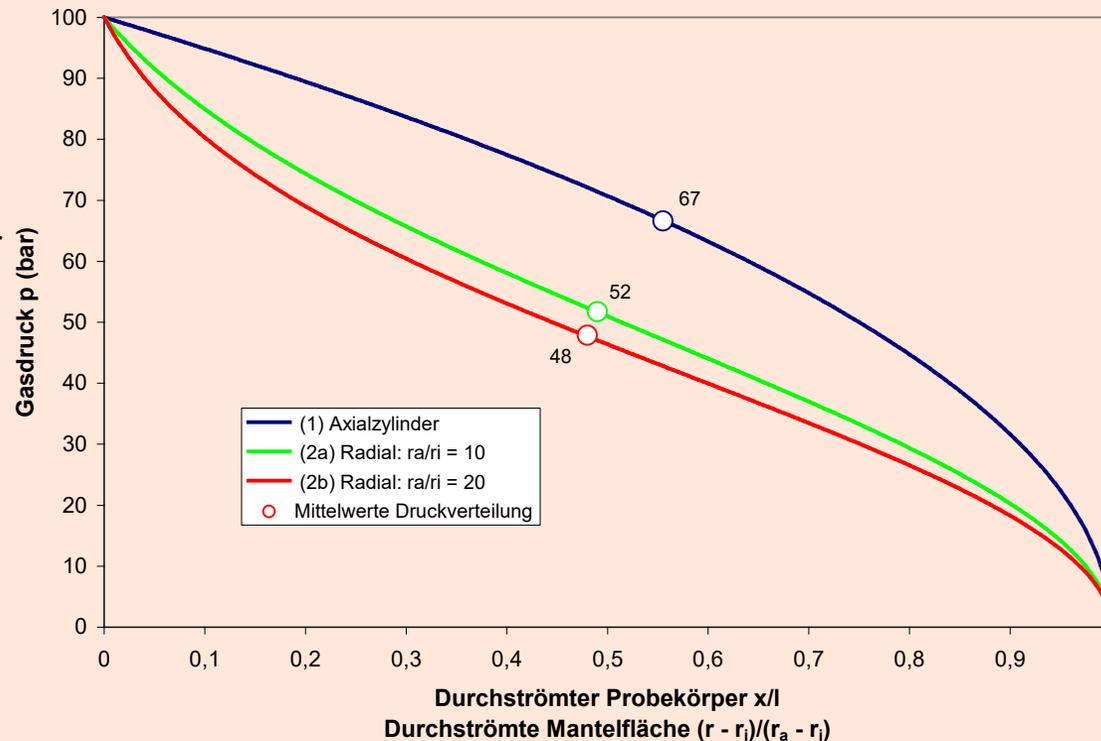


b) radial: Abströmen über die Mantelfläche einer zentralen Injektionsbohrung und Sammlung der durchtretenden Fluidmenge an der Probenaußenfläche.

Druckgefälle in einer zylindrischen Probe

Blau:
Druckgradient bei axialer
Strömung entlang der
Zylinderachse:

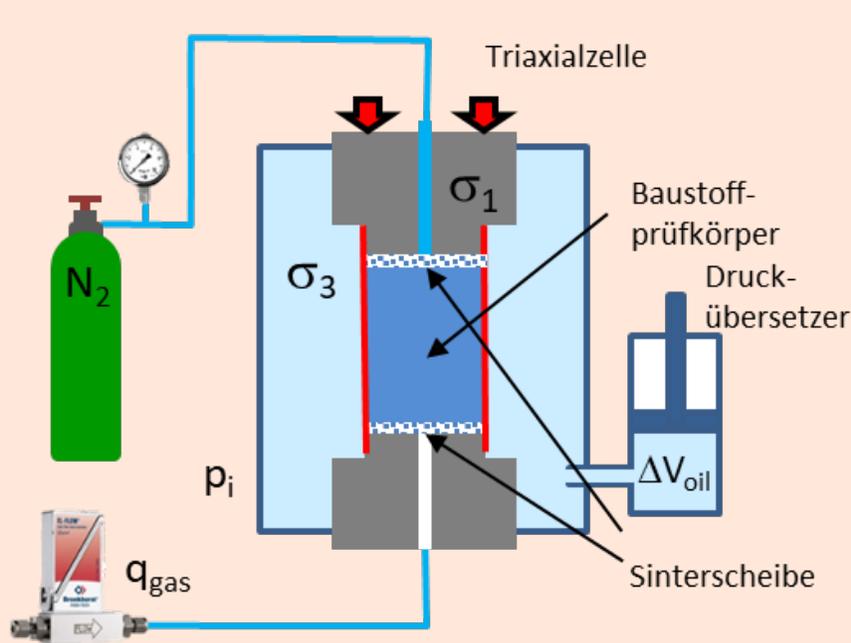
- Nicht linear
- Erhöhter Gradient am Ende
- Geänderte Effektivspannungen?



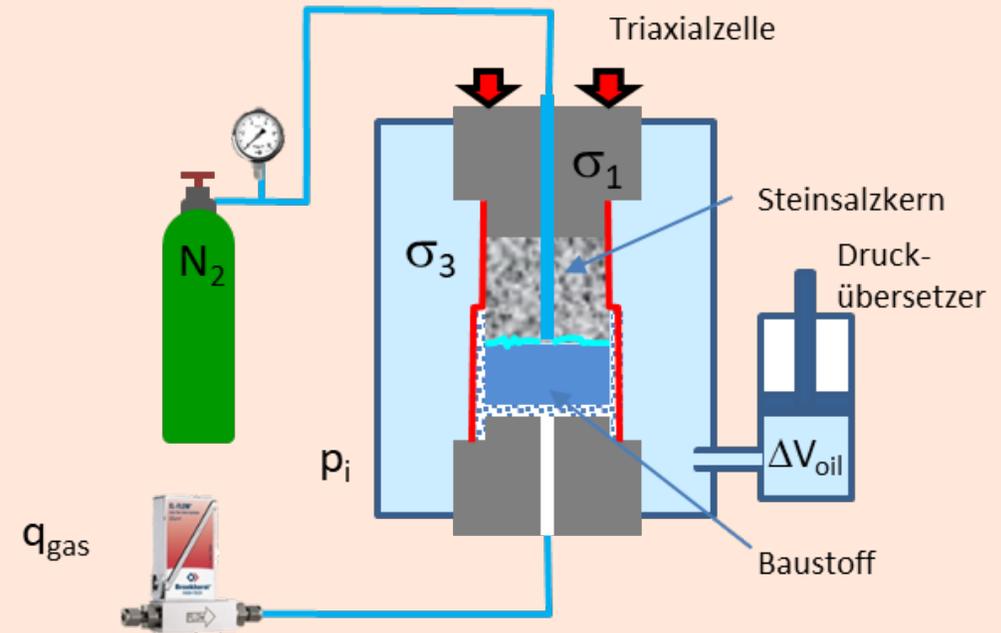
Grün und Rot:
Druckgefälle in einer
gasdurchströmten Wandung
bei radialer Durchströmung:

- (kleinere) lokal erhöhte Druckgradienten
- Mittelwerte Druckverteilung nahe einfachem Mittel

Axiale versus radiale Durchströmung



kompakte Baustoffprobe mit axialer Fließgeometrie



Kontaktfläche Baustoff/Salzgestein mit radialer Geometrie für Fluss auf der Kontaktfläche

Kapillarer Sperrdruck - Definition

- Der kapillare Sperrdruck charakterisiert die Fähigkeit eines mit einer benetzenden Phase gesättigten porösen Mediums, den Durchfluss einer nicht benetzenden Phase zu blockieren. Sein Wert entspricht der Größe des größten Poreneintrittsradius im porösen Medium und kann mit Hilfe der Laplace - Gleichung berechnet werden:

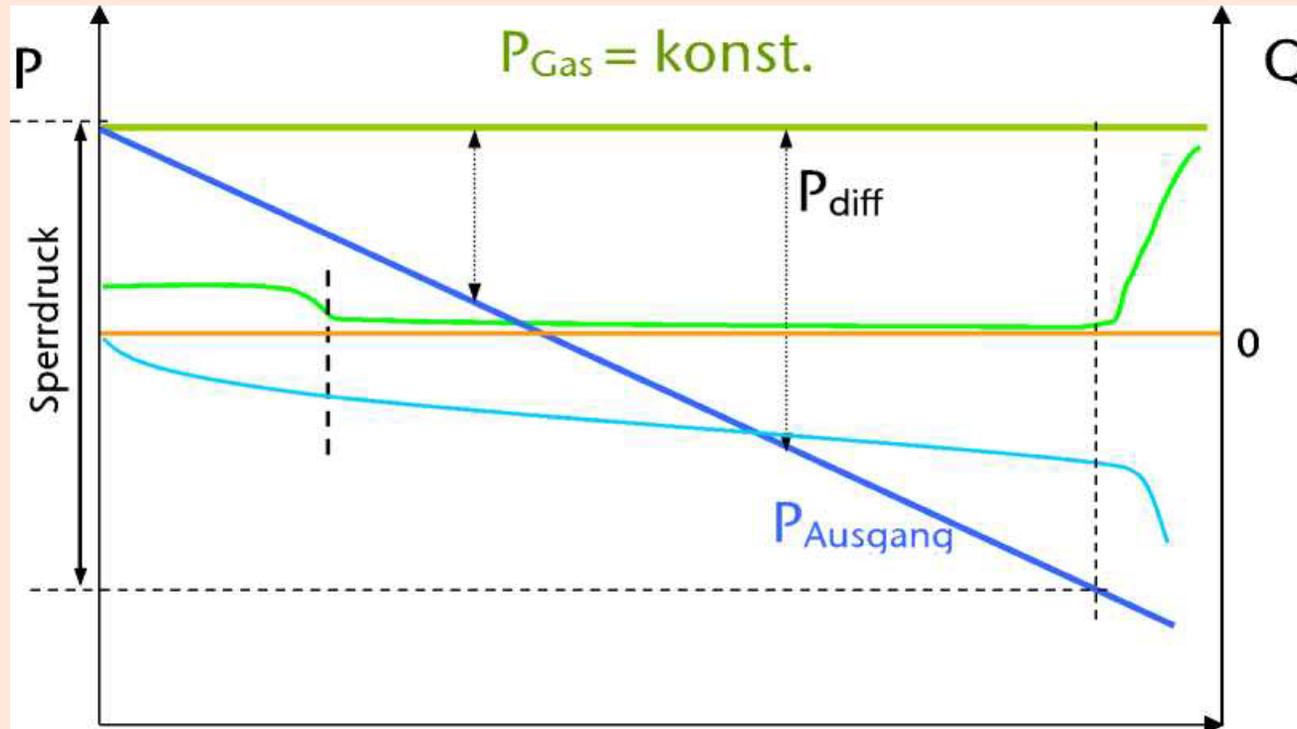
$$P_{th} = 2 \sigma \cos \theta / R_{max. throat.}$$

σ : Grenzflächenspannung des betrachteten Flüssigkeitssystems

θ : Kontaktwinkel

$R_{max. throat.}$: größter Poreneintrittsradius

Kapillarer Sperrdruck



Zeitlicher Verlauf einer Sperrdruckbestimmung

P_{Gas} : Eingangsdruck

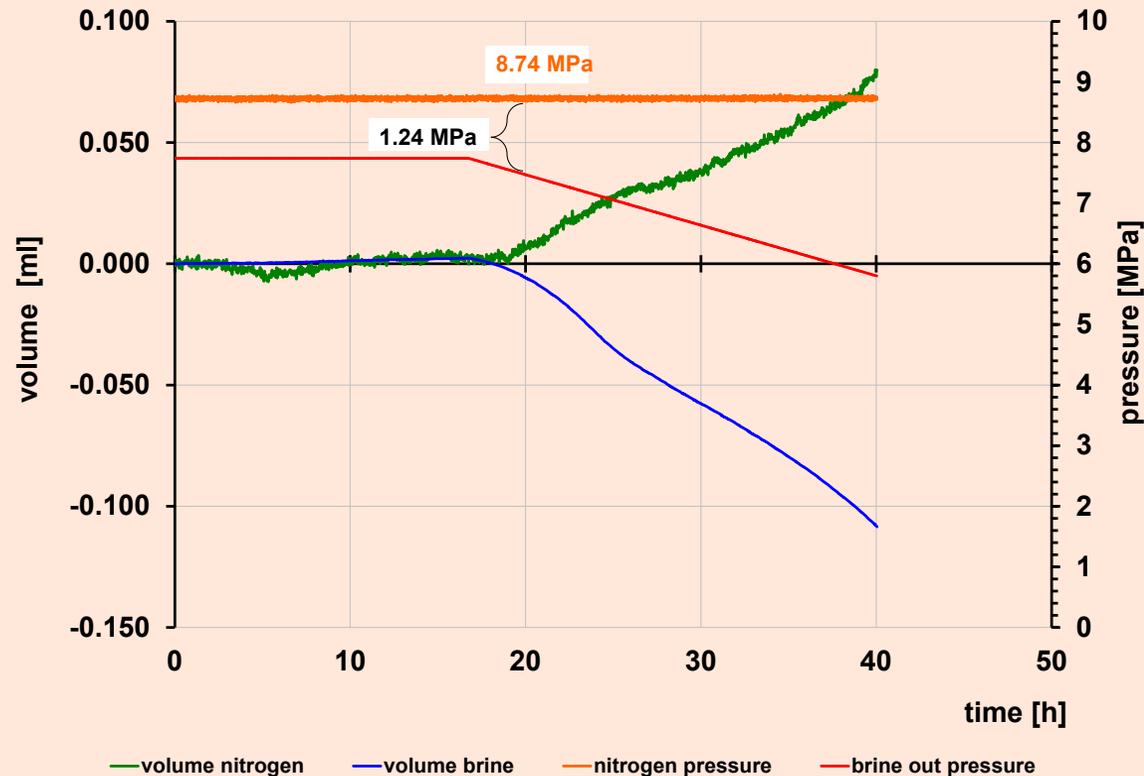
P_{diff} : Druckdifferenz

Q hellgrün: Fließrate Eingang

Q hellblau: Fließrate Ausgang

X-Achse: Zeit

Sperrdruckmessung an einem Tonstein



Modified dynamic injection method:

- constant injection pressure, decreasing back pressure, volume control
- less holding time
- prevention of gas dissolution
- exact detection of threshold pressure
- measurement of the threshold pressure directly at the relevant side of the specimen

Zusammenfassung

- Die Bestimmung der hydraulischen Eigenschaften von möglichen Abdichtbaustoffen erfordert einen hohen präparativen und messtechnischen Aufwand → kein Standardverfahren oder Normversuch
- Für die Konditionierung (Trocknung, Sättigung) von hydrathaltigen Baustoffen gibt es bisher keine verbindliche Empfehlung/Norm (Problem Vergleichbarkeit)
- Die Trocknung von hydrathaltigen Baustoffen bei zu hohen Temperaturen / Vakuum kann zu Vorschädigungen der Probe führen
- Für die Aufsättigung von gering durchlässigen Baustoffen wird eine Durchströmung unter äußerer Einspannung im Langzeitversuch empfohlen
- Für die Gasdurchströmung sehr gering durchlässiger Proben kann eine radiale Strömungsgeometrie gegenüber der üblichen Axialgeometrie vorteilhaft sein
- Bei den üblicherweise zur Verfügung stehenden Proben aus Kontaktzonen ist die radiale Durchströmung anzuraten

Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar



Untersuchungsmethoden zur Charakterisierung von mineralischen Verschlussbaustoffen

Dr.-Ing. Alex-W. GUTSCH

Dr.-Ing. Ellen RIGO

Dipl.-Ing. Hartmann ALBERTS

Materialprüfanstalt für das Bauwesen Braunschweig

06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts



Wesentliche Materialeigenschaften von mineralischen Verschlussbaustoffen

- 1. Eigenschaften der Ausgangsstoffe**
u.a. Qualitätskontrolle, gemäß Baustoffnormen oder aus Forschung
- 2. Eigenschaften im frischen angemischten Zustand**
u.a. Verarbeitung, Transport, Einbau, Qualitätskontrolle am Übergabepunkt
- 3. Thermische und hygrische Eigenschaften**
- 4. Mechanische Eigenschaften (und deren Entwicklung)**
- 5. Baustoffstabilität und chemische Beständigkeit**

Eigenschaften 1. – 4.: → Qualitätskontrolle

Eigenschaften 3. – 5.: → Eingangsparameter für Thermische-Hygrische-Mechanische-Chemische (THMC-) Simulation



06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts



Eigenschaften im frischen angemischten Zustand

- Konsistenzprüfung (Setz-Fließmass, Ausbreitmass, Fließrinne in Abhängigkeit der Konsistenz)
- Luftporengehalt
- Absetzen / Ausseigern von Lösung (Salzbeton)

Ziele

- Qualitätskontrolle
- Sicherstellung von Transport und Einbau, Selbstnivellierung
- Gefügedichtheit
- Kenntnis zur Neigung von Lösungsabsondern



06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts



Eigenschaften im frischen angemischten Zustand



Einbau von Salzbeton

- Lange Transportwege
- Rohrleitungstransport
- Selbstnivellierend und selbstentlüftend am Einbauort
- Gefügedichtheit
- Kenntnis zu Neigung von Lösungsabsondern

Component	Unit	Quantity
Cement CEM III/B 32.5	kg/m ³	328
Fly Ash	kg/m ³	328
Water (total)	kg/m ³	275
Salt (particle size, d = 0 - 20 mm)	kg/m ³	1011

Exemplarische Salzbetonrezeptur



06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts



Eigenschaften im frischen angemischten Zustand

Konsistenzprüfung (dünnflüssiges Medium)

- Ausbreitmaß / Setz-Fließmaß
- Fließrinne



Bestimmung Setzfließmaß bzw. Ausbreitmaß

Fließrinne



06.09.2023



Gutsch, Rigo, Alberts

Eigenschaften im frischen angemischten Zustand



Luftporengehalt



**Lösungsabsondern bei Salzbeton
in den ersten rd. 12 - 24 h**



06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts



Thermische Eigenschaften

- Wärmeleitung
- Wärmekapazität
- Temperaturdehnung
- Wärmeentwicklung

➔ **Eingangsparameter für Temperatur-Simulationsberechnungen**



06.09.2023



Gutsch, Rigo, Alberts

Thermische Eigenschaften

▪ Temperaturdehnung

Mittlerer Wärmeausdehnungskoeffizient α_T in Abhängigkeit der Temperatur

Bezugstemperatur für die Länge in °C	Temperatur in °C	α_T in 1/K
20	30	3,55E-05
20	40	2,93E-05
20	60	2,62E-05

Wärmeausdehnungskoeffizient nach DIN 51045-1, **Salzbeton**



06.09.2023



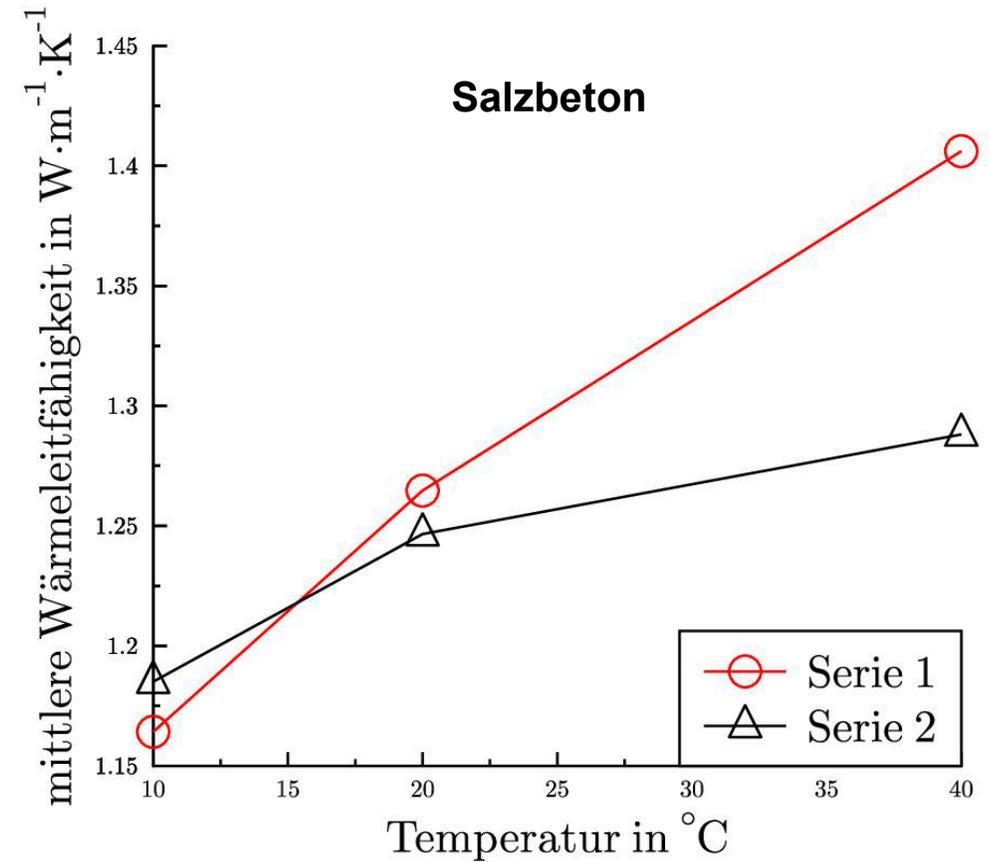
Gutsch, Rigo, Alberts

Thermische Eigenschaften

▪ Wärmeleitung



Einplattengerät DIN EN 12667



06.09.2023



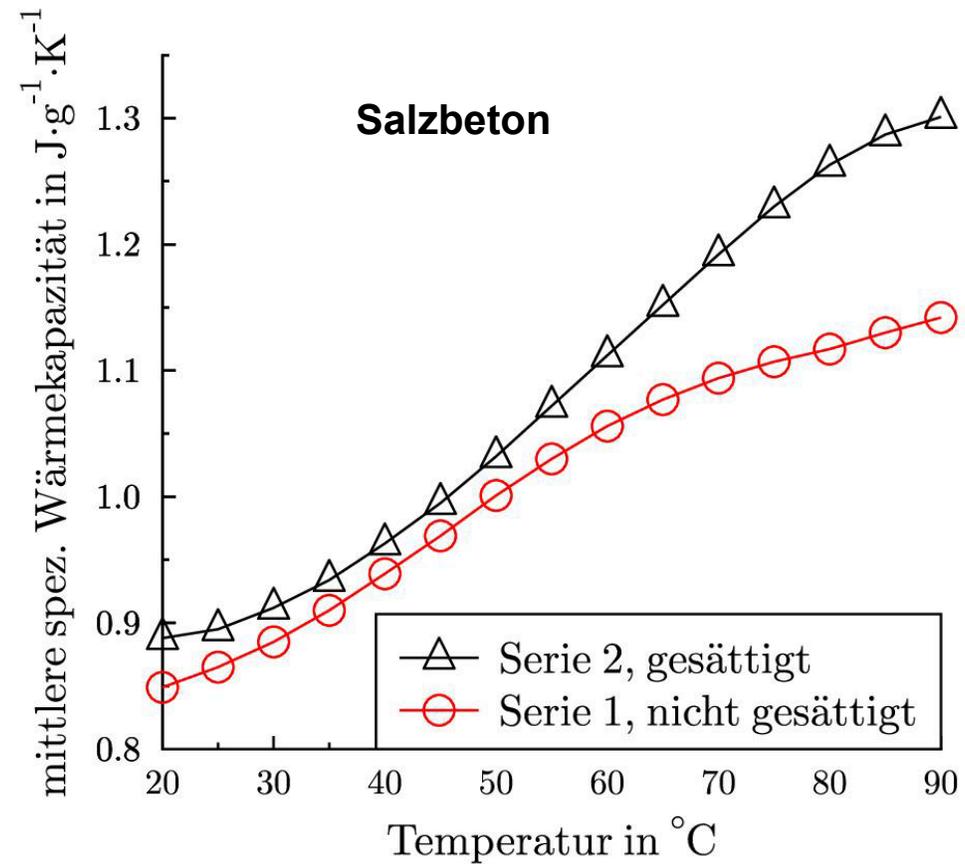
Gutsch, Rigo, Alberts

Thermische Eigenschaften

■ Wärmekapazität



Isobare spezifische Wärmekapazität
nach der Saphirmethode mittels DSC



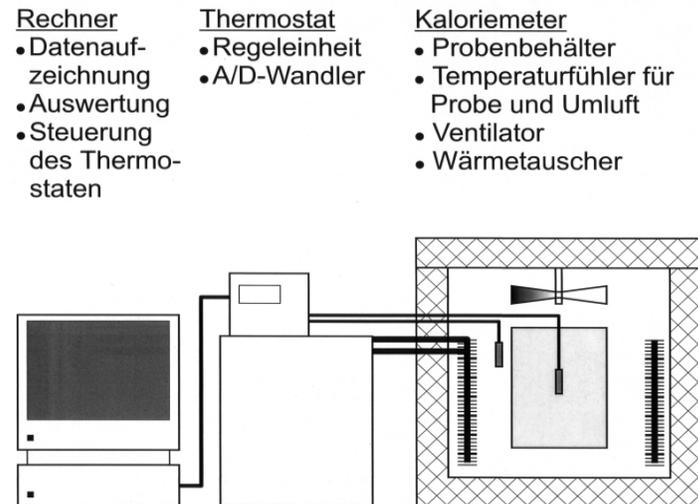
06.09.2023



Gutsch, Rigo, Alberts

Thermische Eigenschaften – Wärmefreientwicklung / -freisetzung

- **Wärme- bzw. Temperaturentwicklung**
 - **Adiabatische oder semi-adiabatische Temperaturentwicklung**
- ➔ **Temperatur-Modellierung**

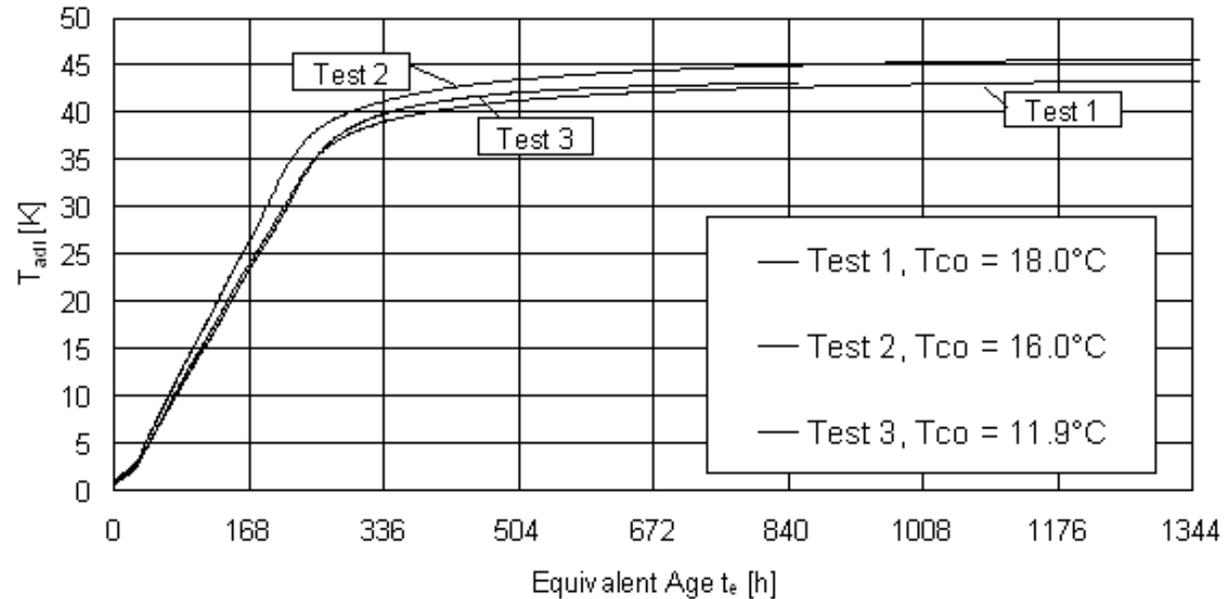


06.09.2023



Gutsch, Rigo, Alberts

Thermische Eigenschaften – Wärmeentwicklung



Adiabatische Wärme- bzw. Temperaturentwicklung eines Salzbetons

➔ Eingangsp parameter für Temperatur-Simulationsberechnungen



06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts



Mechanische Eigenschaften

- **Mechanische Kurzzeiteigenschaften**
- Druck- und Zugfestigkeit sowie Elastizitätsmodul und deren Entwicklungen in Abhängigkeit der Erhärtung
- **Mechanische Langzeiteigenschaften**
 - Langzeiteigenschaften mit Krafteinwirkung: Kriechen oder Relaxation
 - Langzeiteigenschaften ohne Krafteinwirkung: Schwinden (mit gleichzeitiger Trocknung) und autogenes Schwinden (ohne Trocknung / mit Luftabschluss)
 - Langzeiteigenschaften mit Temperatureinwirkung sowie mit und ohne Krafteinwirkung
- **Rissverhalten**, Neigung zu Eigenspannungsrisssbildung
- **Verbundeigenschaften** zu angrenzenden Bauteilen oder Gestein

➔ **Eingangsparameter für TM-Simulationsberechnungen**



06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts



Mechanische Eigenschaften – Kurzzeiteigenschaften

- Druckfestigkeit
- Zugfestigkeit
- Elastizitätsmodul



Salzbetonproben



Salzbeton nach
Druckversuch



Druckversuch



Zug-E-Modul-Probe

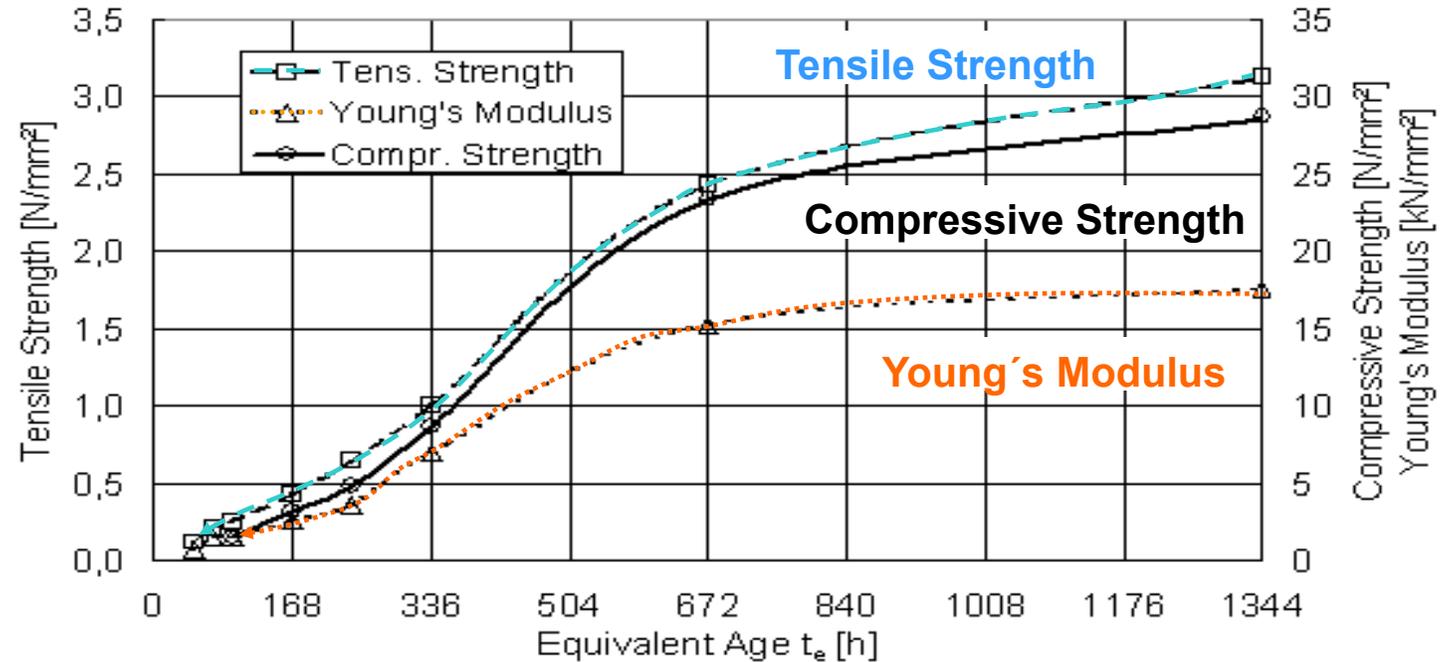


06.09.2023



Gutsch, Rigo, Alberts

Mechanische Eigenschaften – Zeitliche Entwicklung der Kurzzeiteigenschaften



- Zeitliche Entwicklung der mechanischen Kurzzeiteigenschaften für TM-Modellierung
- Salzbeton: E-Modul, Zug- und Druckfestigkeit entwickeln sich unterschiedlich

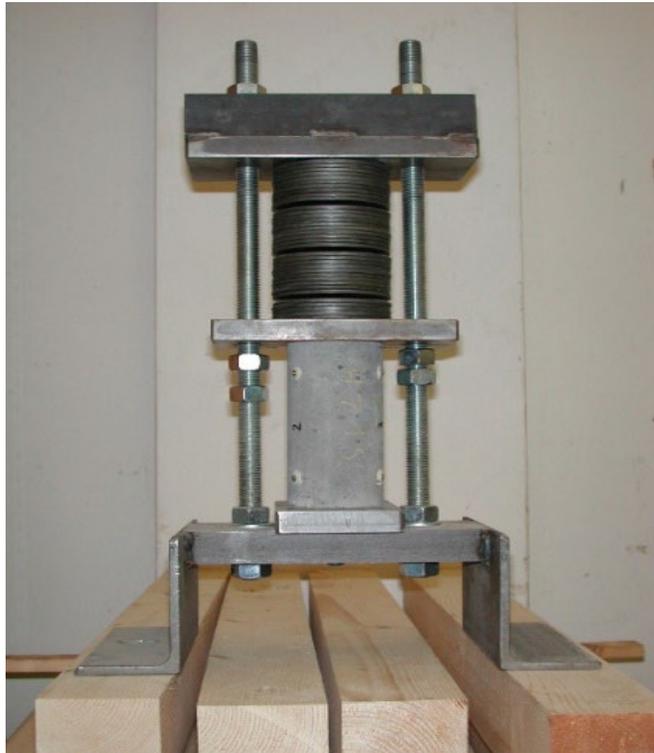


06.09.2023

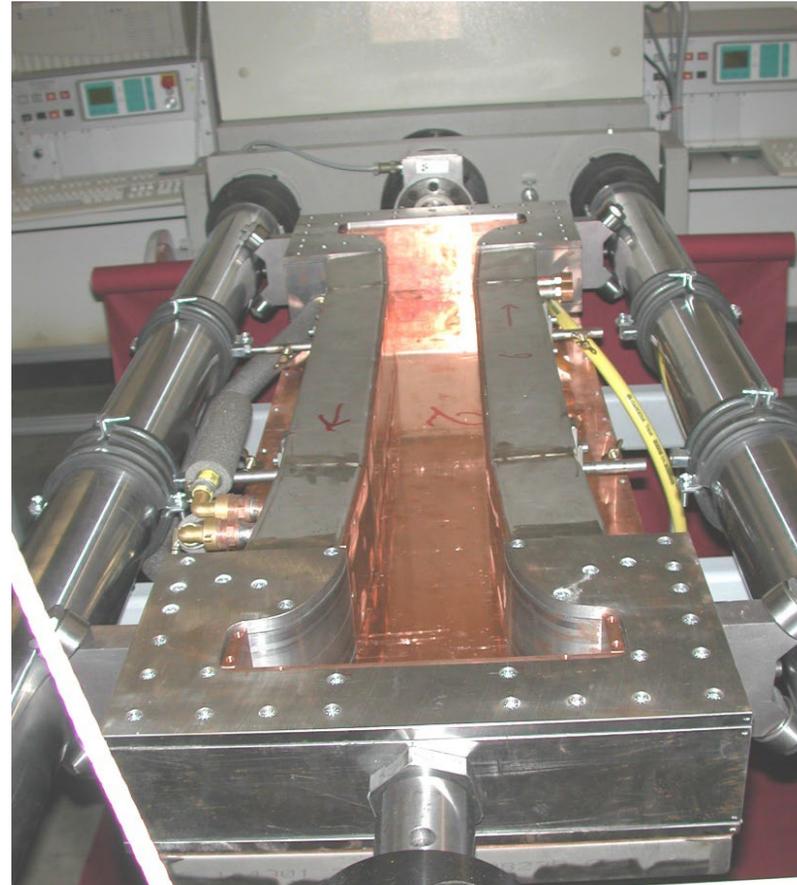
Gutsch, Rigo, Alberts



Mechanische Eigenschaften – Kriechen



- Druckkriechstand



- Zugkriechstand für Zugkriechversuche von mineralischen Baustoffen während der Erhärtung



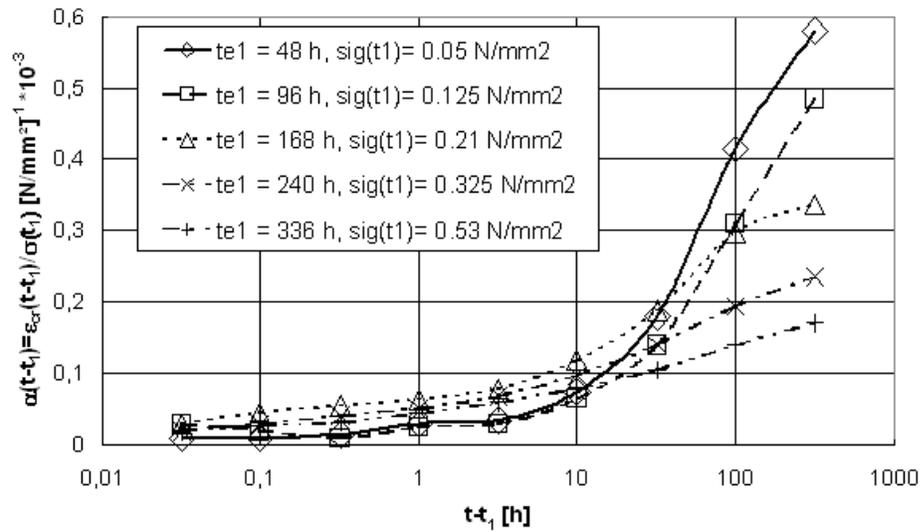
06.09.2023

lberts

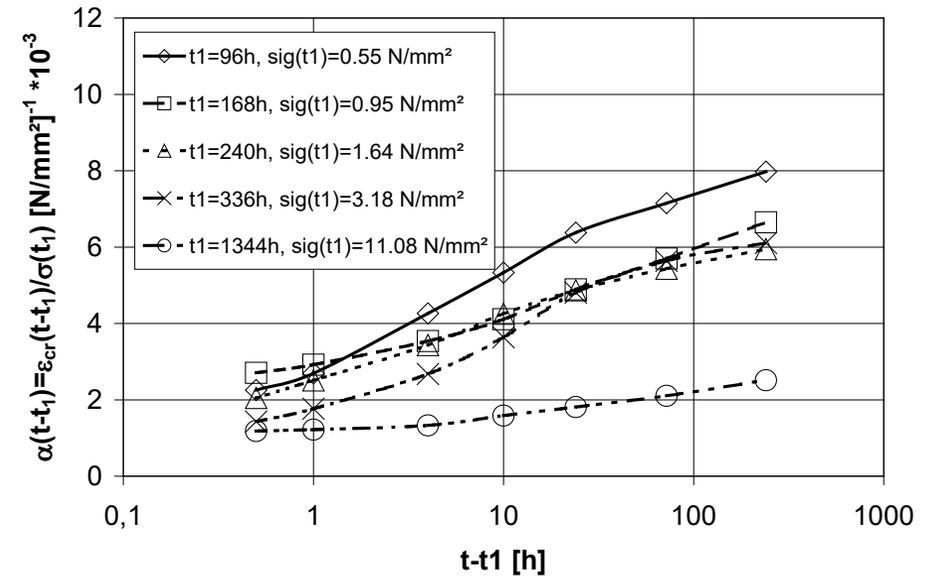


Mechanische Eigenschaften – Zug- und Druckkriechen

■ Kriechen von Salzbeton



Zugkriechen



Druckkriechen

Zeitliche Entwicklung von Druck- und Zugkriechen für TM-Modellierung

➔ Eingangsparmeter für TM-Modellierung

06.09.2023

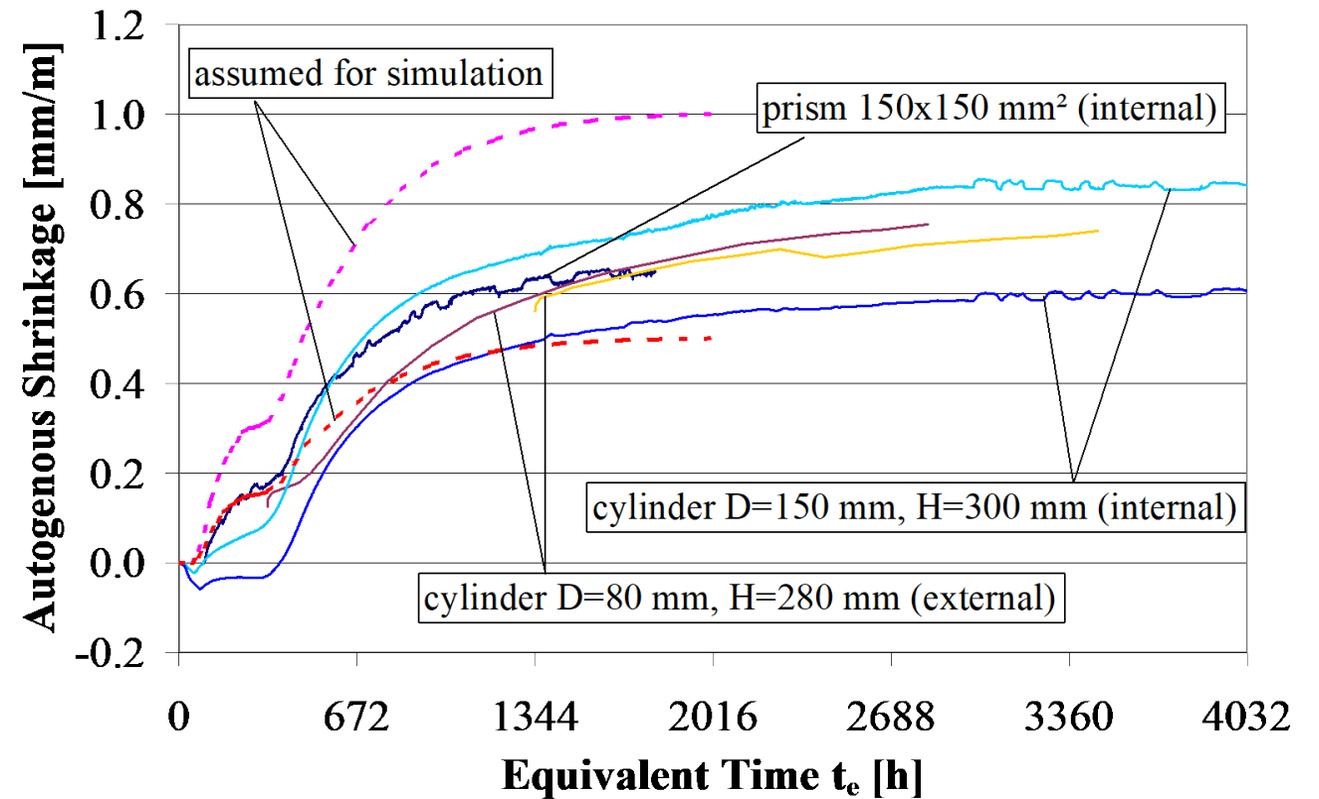
Gutsch, Rigo, Alberts



Mechanische Eigenschaften – autogenes Schwinden



Bestimmung des autogenen Schwindens von Salzbeton

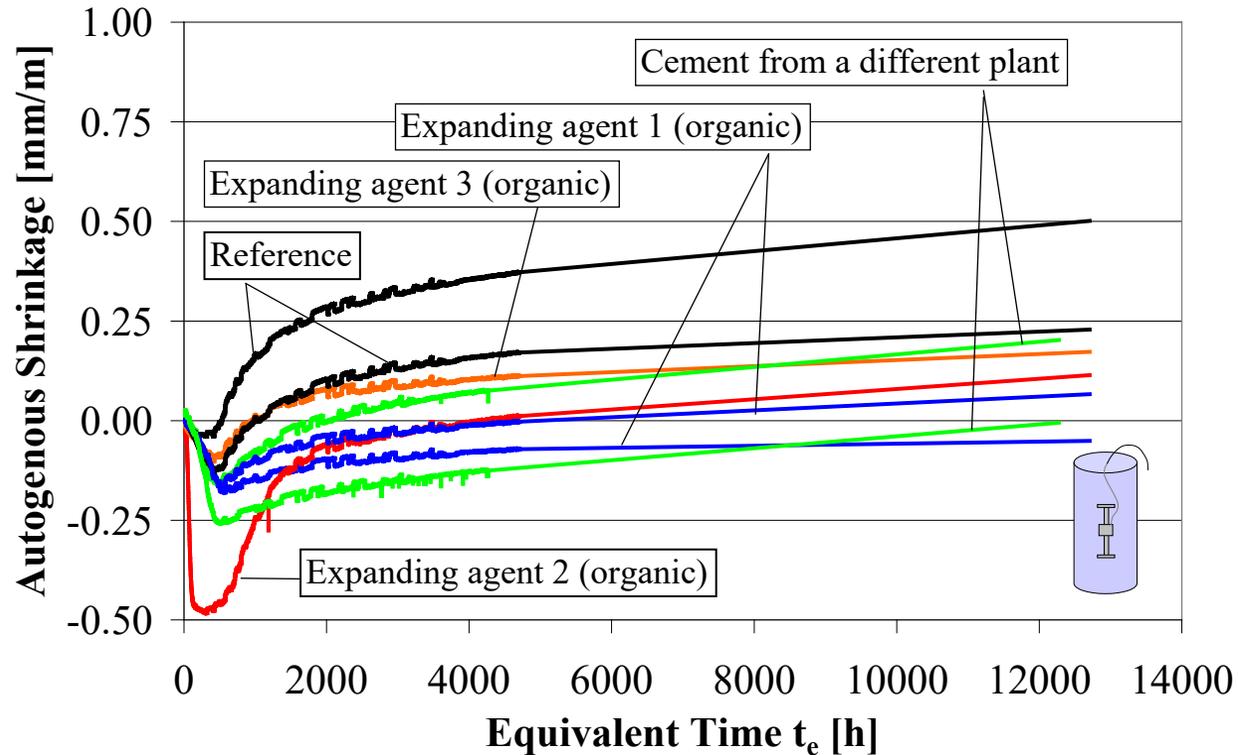


06.09.2023



Gutsch, Rigo, Alberts

Mechanische Eigenschaften – autogenes Schwinden



Autogenes Schwinden von Salzbeton ist größer als Temperaturdehnung bei der Erhärtung

➔ Zwangsspannungen hängen stark vom autogenen Schwinden ab

Reduktion von autogenem Schwinden v. Salzbeton durch organische oder anorganische Zusatzstoffe und Zementauswahl möglich



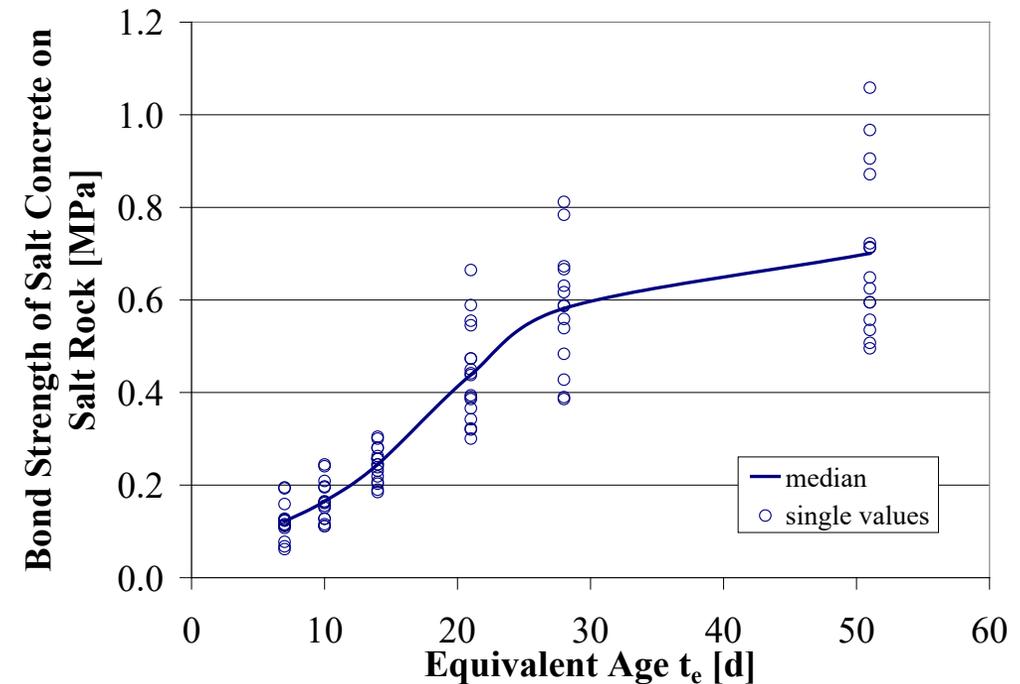
06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts



Mechanische Eigenschaften

- Verbundversuche Salzbeton - Gebirge



- Untersuchung der Verbundzone
- Altersabhängige Entwicklung der Haftzugfestigkeit

➔ **Eingangsparameter für TM-Modellierung von Zwangsspannungen während der Erhärtung**

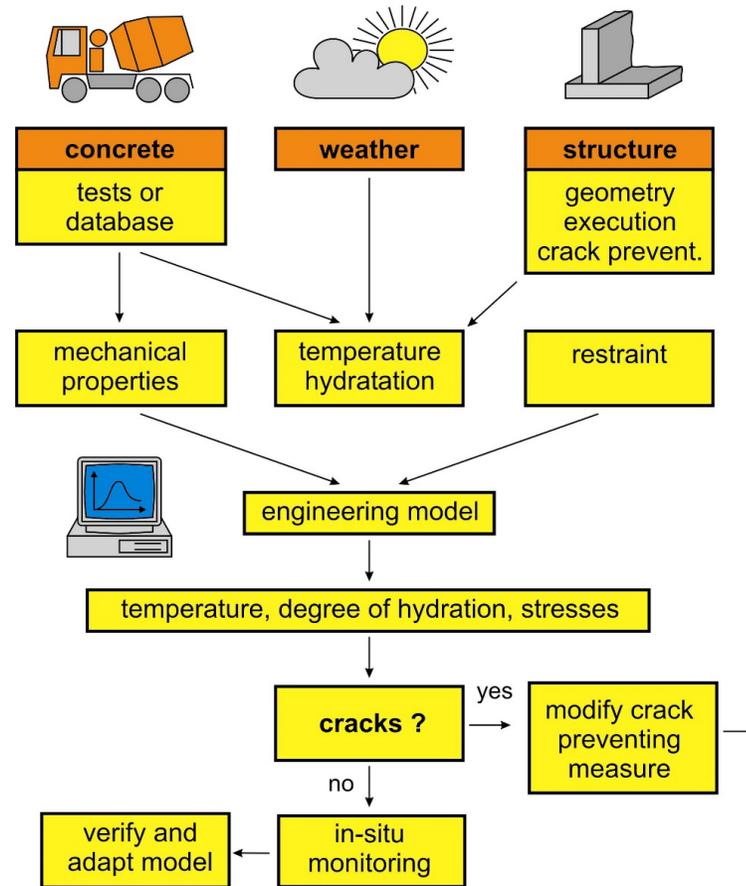


06.09.2023



Gutsch, Rigo, Alberts

T-M-Simulation – Planungs-Tool "Massige erhärtenden Betonbauteile"

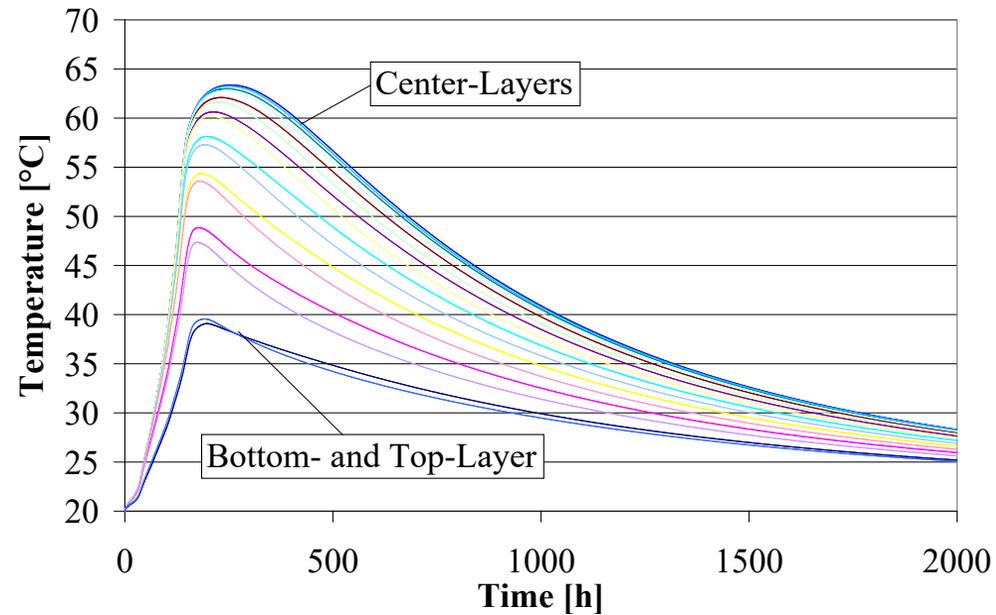


06.09.2023

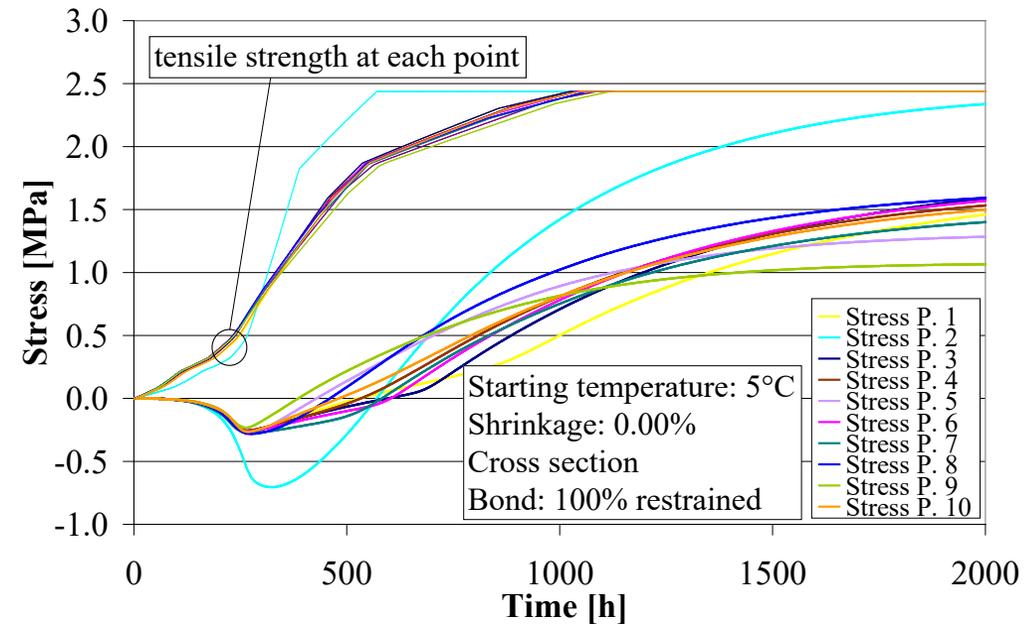


Gutsch, Rigo, Alberts

T-M-Simulation Abdichtbauwerk während der Erhärtung - Beispiel



Temperaturentwicklung
 Querschnitt 3,3 m x 3,3 m, Salzbeton



Spannungs- und Festigkeitsentwicklung
 Querschnitt 3,3 m x 3,3 m, Salzbeton



06.09.2023



Gutsch, Rigo, Alberts

Baustoffstabilität und chemische Beständigkeit – Untersuchungsmethoden

- Ziel: Nachweisführung der Langzeitstabilität
- Ermittlung von Materialeigenschaften:
 - Kenndaten zu Transportprozessen (z.B.: Diffusionskoeffizienten, Sorptionseigenschaften, Wasseraufnahmen, Luftporengehalt, Porengrößenverteilung, Wasserdampfdiffusion, Permeabilität)
 - Thermische Eigenschaften (Wärmeausdehnungskoeffizienten, Wärmeleitfähigkeiten, spezifische Wärmekapazität, Übergangskoeffizienten)
 - Mineralogische Eigenschaften (Phasenzusammensetzung, Gefügebeschreibung)
 - Untersuchungen zur Veränderung von Struktur und Gefüge bei Beaufschlagung mit Medien (z.B. mit Hilfe von Mikroskopie, Röntgendiffraktometrie, FTIR Spektroskopie, Porengrößenverteilung)

➔ **Eingangsparameter für Simulationsberechnungen**



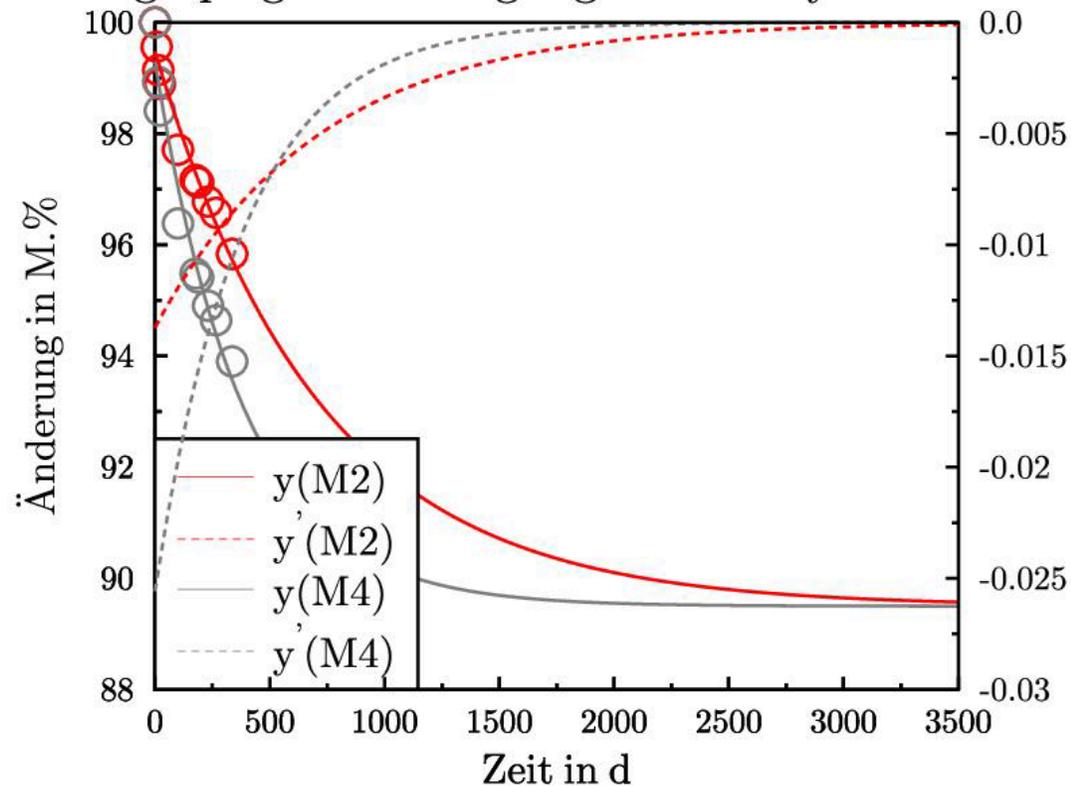
06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts



Baustoffstabilität und chemische Beständigkeit – Trocknung von Salzbeton-Proben

Anfitten an gespiegelter Sättigungsfunktion $y = a + b \cdot \exp(-c \cdot x)$



Salzbeton

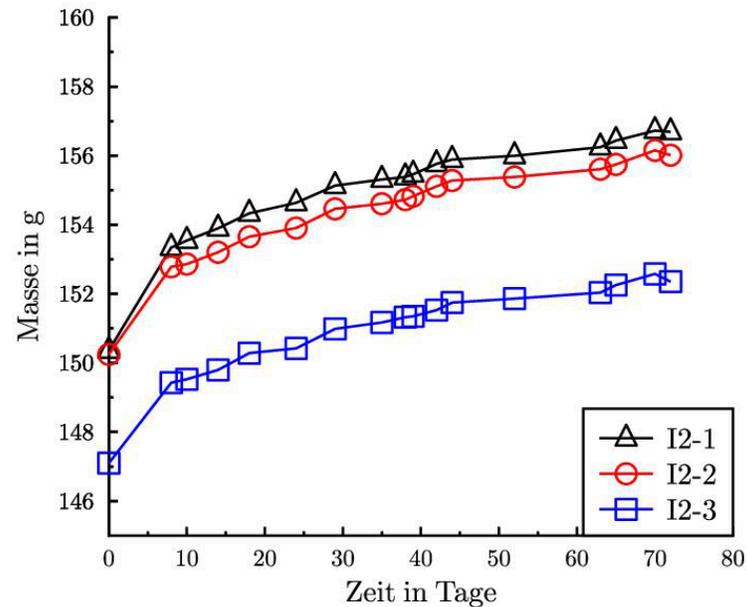
Probekörper $d = 100 \text{ mm}$ $h = 50 \text{ mm}$;
 Getrocknet wurde bei $40 \text{ }^\circ\text{C}$ und 33%
 rel. Luftfeuchte im Klimaschrank

06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts

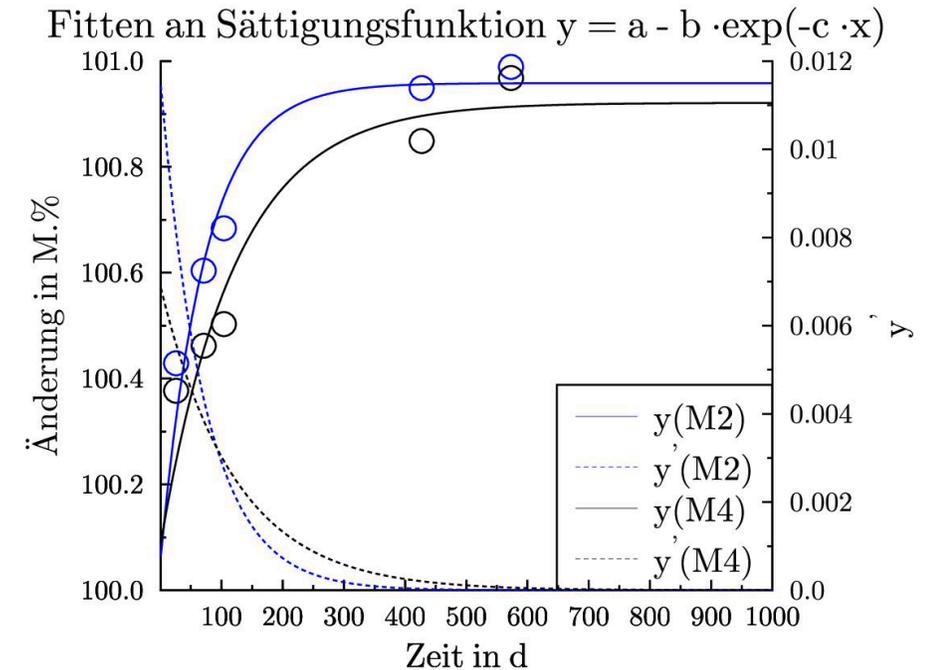


Baustoffstabilität und chemische Beständigkeit – Sättigung von Salzbetonproben in NaCl-Lösung



Salzbeton

Probekörper: 70 mm * 50 mm * 20 mm



Salzbeton

Probekörper d = 100 mm, h = 50 mm

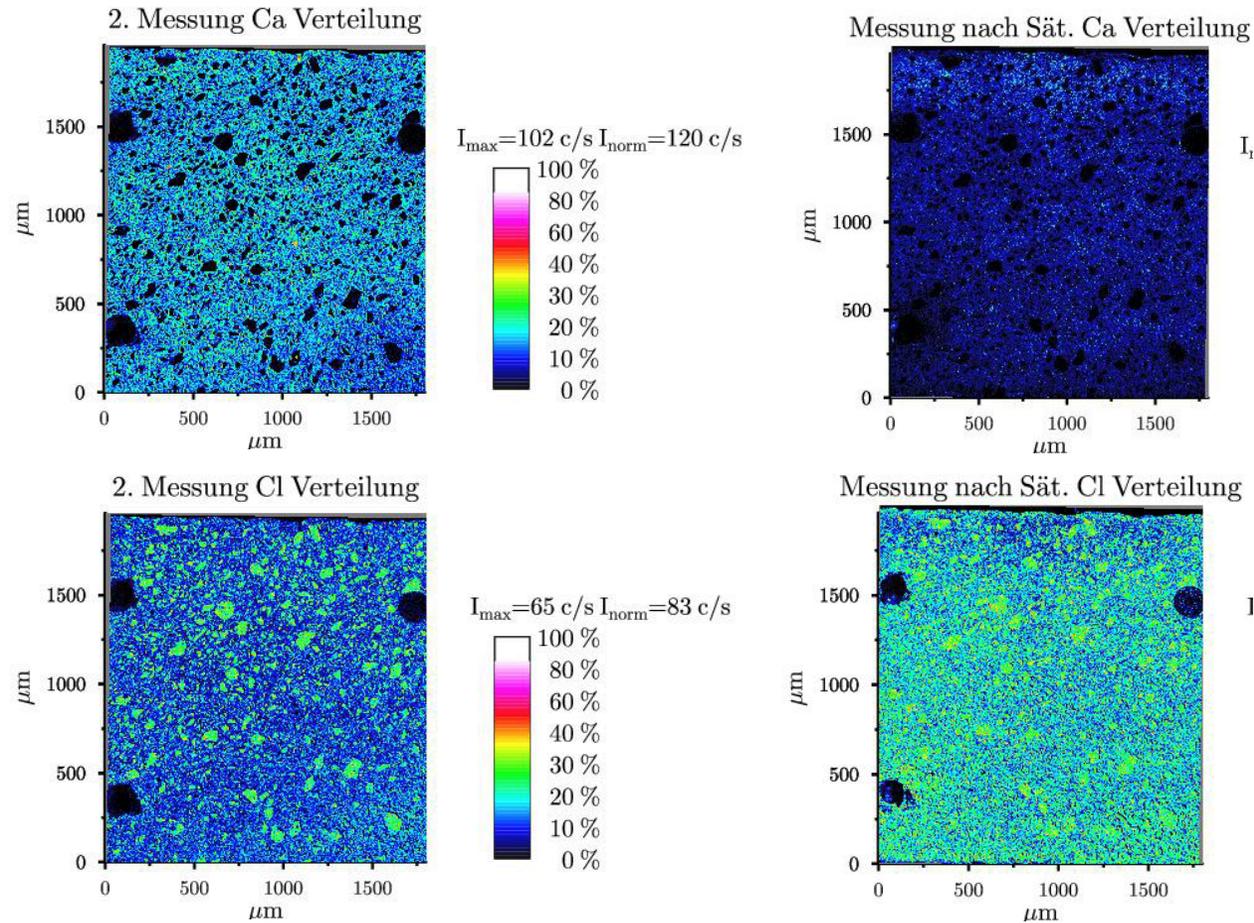


06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts



Baustoffstabilität und chemische Beständigkeit – Messungen mit der μ -RFA



06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts



Vielen Dank!

Kontakt

- **Dr.-Ing. Alex-W. GUTSCH** **Dr.-Ing. Ellen RIGO** **Dipl.-Ing. Hartmann ALBERTS**

Division of Structures & Construction Materials

- **Materialprüfanstalt für das Bauwesen Braunschweig**
Braunschweig Civil Engineering Materials Testing Institute
Beethovenstraße 52
D-38106 Braunschweig
- Phone +49 531 391 5400
- E-Mail a.gutsch@mpa.tu-bs.de e.rigo@mpa.tu-bs.de h.alberts@mpa.tu-bs.de
- www.mpa.tu-bs.de



06.09.2023

Gutsch, Rigo, Alberts





Langzeitversuche - Kriechverhalten von M4-Salzbeton aus dem ERAM

Werner Gräsle

- Ein ambitioniertes Untersuchungsprogramm
- Was bedeutet "Einfluss von σ_d und σ_o auf das Kriechverhalten"?
- Testergebnisse: Triaxialer Kriechversuch
- Die funktionale Form der Zeitabhängigkeit (empirisches Modell)
- Testergebnisse: Uniaxiale Kriechversuche
- Auswertungsmethodik
 - Parameterbestimmung des empirischen Modells: Anpassung von $\epsilon(t)$ oder $\dot{\epsilon}(t)$?
 - ϵ -Fits: Möglichkeiten, Komplikationen und Fallgruben
 - Die Berechnung von Verformungsraten $\dot{\epsilon}(t)$ aus gemessenen ϵ -Werten
- Zusammenfassung

Ein ambitioniertes Untersuchungsprogramm



Beauftragt durch BGE:

– Untersuchung des Einflusses
und mittlerer Norm

Proben:

– 8 Jahre altes Material
sowie aus Kernbohr

Stärke	Deviator	Anzahl Proben		
		Kriechen (12-16 Monate)	Kriechen (3-5 Monate)	Relaxation (3-5 Monate)
1	$\sigma_{diff} = \sigma_1 - \sigma_3$ (12-16 Monate)	1	1	1
2	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
3	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
4	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
5	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
6	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
7	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
8	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
9	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
10	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
11	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
12	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
13	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
14	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
15	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
16	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
17	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
18	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
19	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
20	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
21	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
22	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
23	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
24	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
25	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
26	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
27	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
28	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
29	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
30	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
31	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
32	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
33	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
34	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
35	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
36	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
37	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
38	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
39	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
40	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
41	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
42	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
43	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
44	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
45	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
46	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
47	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
48	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
49	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
50	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
51	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
52	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
53	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
54	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
55	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
56	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
57	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
58	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
59	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
60	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
61	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
62	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
63	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
64	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
65	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
66	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
67	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
68	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
69	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
70	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
71	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
72	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
73	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
74	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
75	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
76	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
77	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
78	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
79	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
80	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
81	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
82	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
83	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
84	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
85	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
86	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
87	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
88	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
89	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
90	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
91	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
92	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
93	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
94	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
95	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
96	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
97	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
98	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
99	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1
100	$\sigma_2 \cdot \sigma_3$	1	1	1



Daher: Hier nur wenige Ergebnisse
Statt dessen: Darstellung einer verbesserten Methodik zur Auswertung von Kriechversuchen

bzw. 14.5 – 20.8 Prüfmaschinen-Jahre

Was bedeutet „Einfluss von σ_{dif} und σ_0 auf das Kriechverhalten “ ?

Kriechen unter konstanten Randbedingungen (z. B. $\sigma_{dif}, \sigma_0, T$)

ist ein zeitabhängiger Prozess, d. h.

$$\dot{\varepsilon} = f(t; \sigma_{dif}, \sigma_0, T, \dots)$$

Unsere Hoffnung: Die Art der funktionalen Zeitabhängigkeit ist unabhängig von den Werten der Randbedingungen σ_{dif}, σ_0 und T .

Dann lässt sich $\dot{\varepsilon}$ auch schreiben als

$$\dot{\varepsilon} = f(t; p_1, \dots, p_n) \quad \text{mit Randbedingungs - abhängigen Parametern } p_i(\sigma_{dif}, \sigma_0, T, \dots)$$

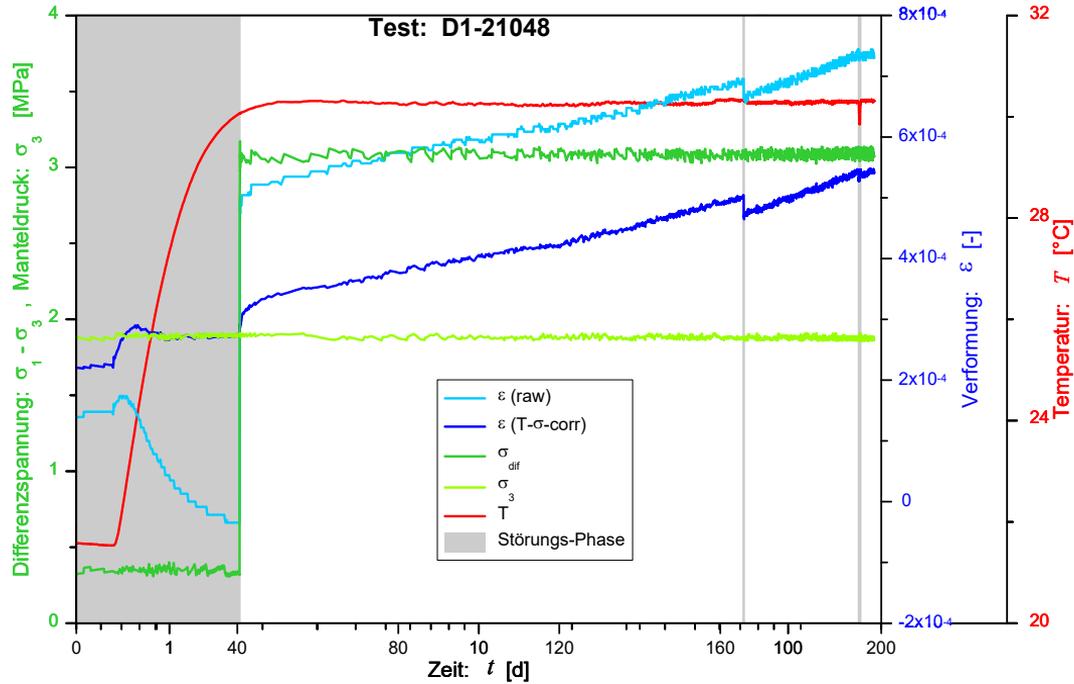
Damit lässt sich der "Einfluss von σ_{dif} und σ_0 auf das Kriechverhalten" vollständig durch die Randbedingungs-Abhängigkeit der Parameter beschreiben.

Dafür muss man aber erst einmal die funktionale Zeitabhängigkeit $\dot{\varepsilon} = f(t; p_1, \dots, p_n)$ kennen !

Dies wird Hauptgegenstand der weiteren Darstellung sein. Doch zunächst zu exemplarischen Ergebnissen.

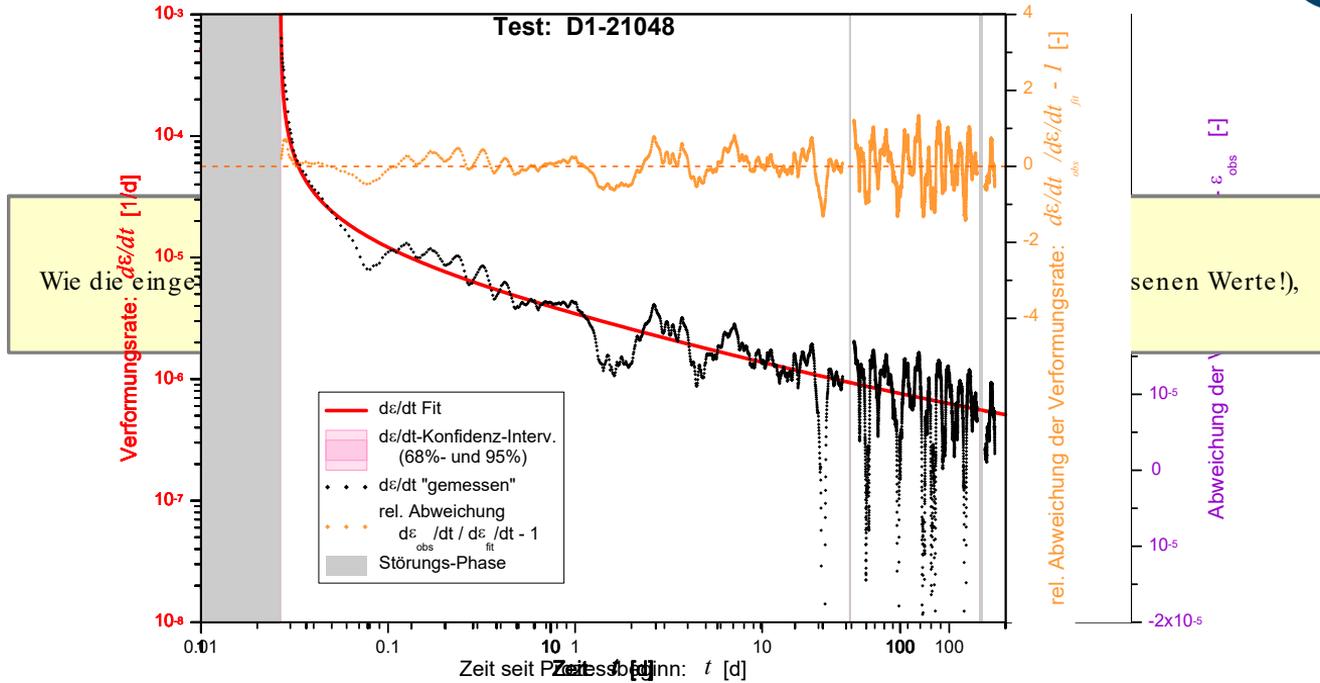
Testergebnisse: Triaxialer Kriechversuch mit

$$\sigma_{dif} = \sigma_0 = 3 \text{ MPa}$$



Testergebnisse: Triaxialer Kriechversuch mit

$$\sigma_{dif} = \sigma_0 = 3 \text{ MPa}$$



Die funktionale Form der Zeitabhängigkeit (empirisches Modell)

Potenz-Gesetz für $\dot{\varepsilon}(t)$ unter Einbeziehung eines etwaigen stationären Kriechterms:

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_{stat} + a \cdot (t - t_0)^b \quad \Rightarrow \quad \varepsilon = \dot{\varepsilon}_{stat} \cdot (t - t_0) + \frac{a}{b+1} \cdot (t - t_0)^{b+1} + \varepsilon_0$$

Mit Berücksichtigung von Versuchsstörungen:

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_{stat} + \sum_{k=1}^m \Psi_k(t) \cdot a \cdot (t - t_{0,k})^b$$

$$\varepsilon = \dot{\varepsilon}_{stat} \cdot (t - t_{0,1}) + \sum_{k=1}^m \Psi_k(t) \cdot \left(\frac{a}{b+1} \cdot (t - t_{0,k})^{b+1} + \varepsilon_{0,k} \right)$$

Mit Berücksichtigung von Versuchsstörungen (vereinfachte Form ohne Referenzzeit-Verschiebung durch Störungsphasen):

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_{stat} + \sum_{k=1}^m \Psi_k(t) \cdot a \cdot (t - t_0)^b$$

$$\varepsilon = \dot{\varepsilon}_{stat} \cdot (t - t_0) + \sum_{k=1}^m \Psi_k(t) \cdot \left(\frac{a}{b+1} \cdot (t - t_0)^{b+1} + \varepsilon_{0,k} \right)$$

Material-Parameter :

a = multiplikativer Parameter

b = Exponent

$\dot{\varepsilon}_{stat}$ = stationäre Kriechrate

Versuchsbedingte Parameter :

t_0 bzw. $t_{0,k}$ = Referenzzeitpkt. ("Prozess-Nullpunkt")

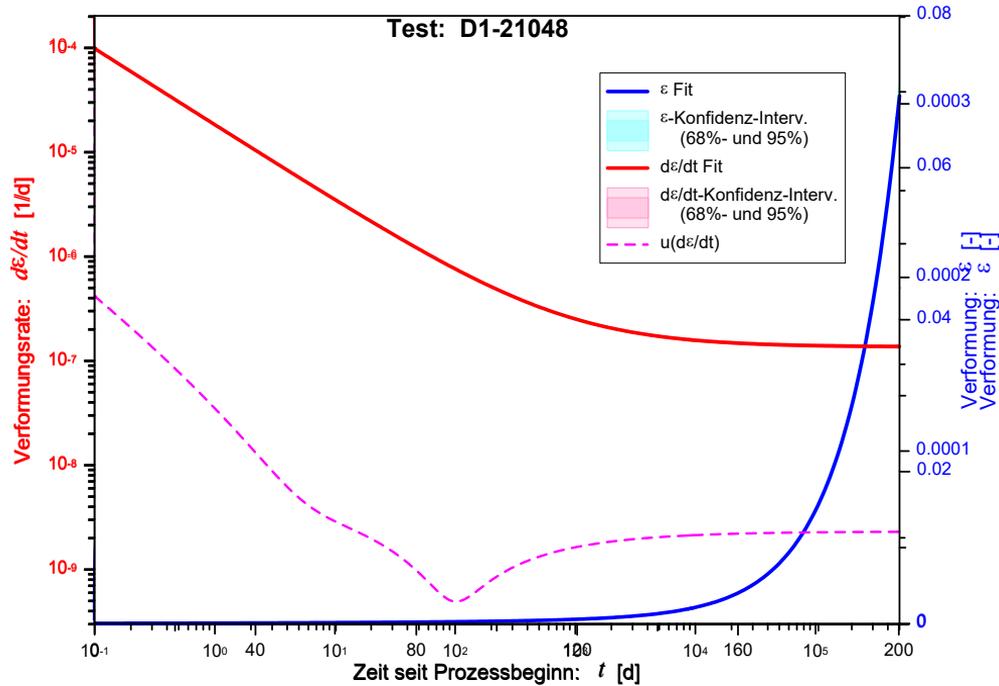
ε_0 bzw. $\varepsilon_{0,k}$ = Integrationskonstanten

$$\Psi_k(t) := \theta(t - ta_k) \cdot \theta(te_k - t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < ta_k \vee t > te_k \\ 1 & \text{für } ta_k \leq t \leq te_k \end{cases}$$

mit Heaviside-Funktion: $\theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ 1 & \text{für } x \geq 0 \end{cases}$

$[ta_k, te_k]$ = k -tes nicht gestörtes Messintervall

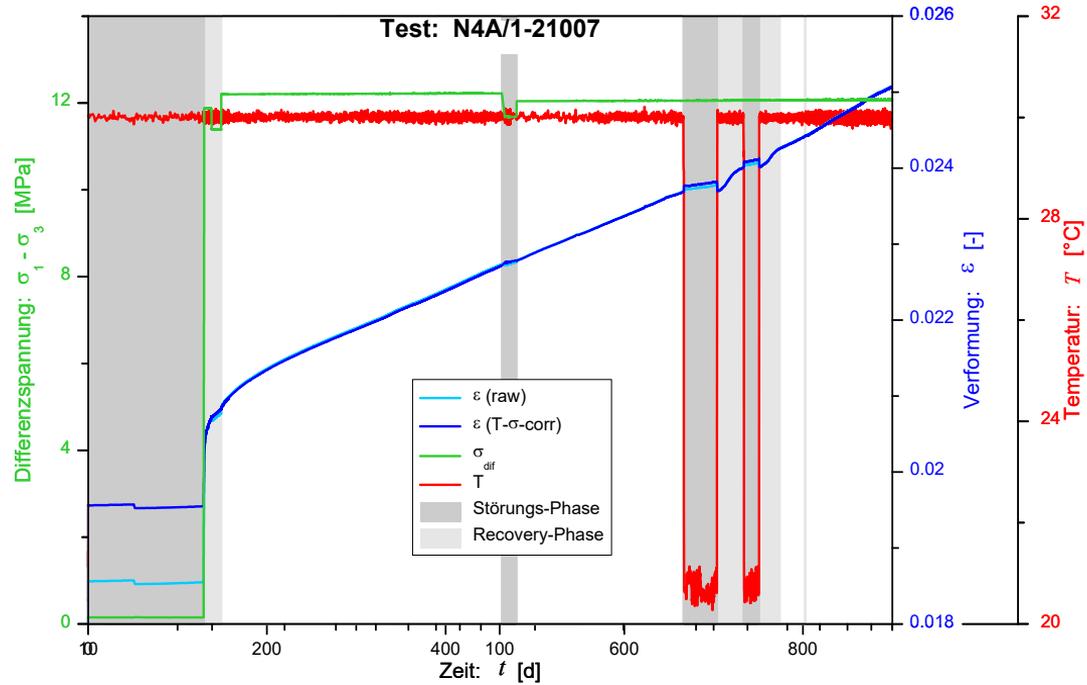
Testergebnisse: Triaxialer Kriechversuch mit $\sigma_{dif} = \sigma_0 = 3 \text{ MPa}$



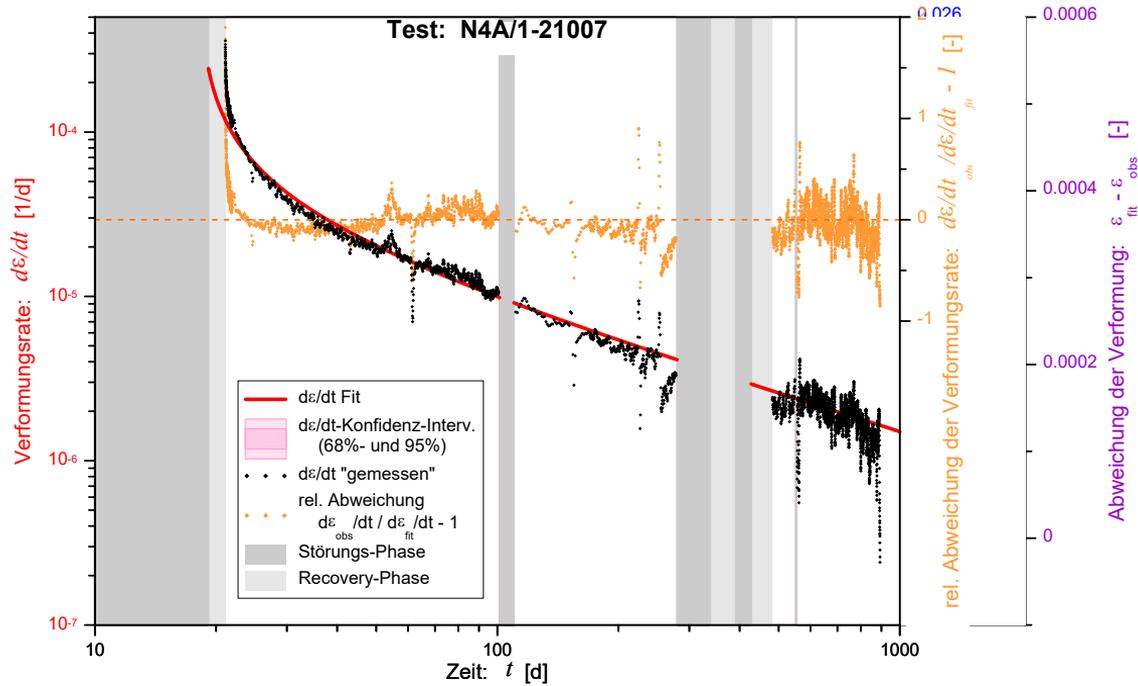
$\epsilon(t)$	
n	40392
R^2	0.9958
$RMSE$	2.41
ta_1, te_1	1.6873 d 71.81 d
ta_2, te_2	71.85 d 169.065 d
ta_3, te_3	171.432 d 190 d

a	1.7995	0.0017
b		0.0011
$\dot{\epsilon}_{stat}$		0.023
t_0		0.00008 d
$\epsilon_{0,1}$		0.004
$\epsilon_{0,2}$		0.004
$\epsilon_{0,3}$		0.004

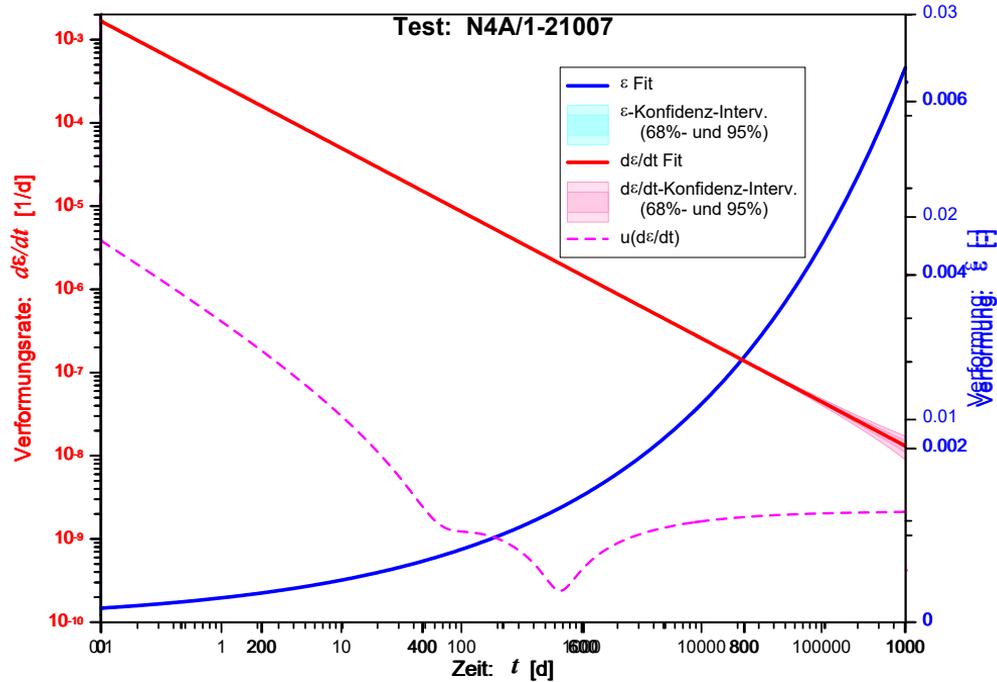
Testergebnisse: Uniaxialer Kriechversuch mit $\sigma_{dif} = 12 \text{ MPa}$, $\sigma_0 = 4 \text{ MPa}$



Testergebnisse: Uniaxialer Kriechversuch mit $\sigma_{dif} = 12 \text{ MPa}$, $\sigma_0 = 4 \text{ MPa}$



Testergebnisse: Uniaxialer Kriechversuch mit $\sigma_{dif} = 12 \text{ MPa}$, $\sigma_0 = 4 \text{ MPa}$



$\epsilon(t)$	
n	456150
R^2	0.9999
$RMSE$	1.18
ta_1, te_1	21.0597 d 101.2402 d
ta_2, te_2	109.9097 d 279.543 d
ta_3, te_3	480 d 551.021 d
ta_4, te_4	554.1326 d 896 d

a	0.0023
b	0.0004
$\dot{\epsilon}_{stat}$	2.2
t_0	0.007 d
$\epsilon_{0.1}$	0.0005
$\epsilon_{0.2}$	0.0005
$\epsilon_{0.3}$	0.0005
$\epsilon_{0.4}$	0.0005

Testergebnisse: Uniaxiale Kriechversuche mit $\sigma_{diff} = 12 \text{ MPa}$, $\sigma_0 = 4 \text{ MPa}$



Die Unsicherheiten der Parameter und der Model-Prognose sind also extrem klein.

- der “Lohn“ für die Wahl eines geeigneten Modells
- und für eine sehr umfangreiche Datengrundlage
(2½ Jahre Messdauer, ohne Störungsphasen >460.000 Datensätze)

Aber Vorsicht, keine Fehlinterpretation !

Testergebnisse: Uniaxiale Kriechversuche mit $\sigma_{diff} = 12 \text{ MPa}$, $\sigma_0 = 4 \text{ MPa}$



Vollständige Form der Gauss'schen Fehlerfortpflanzungsformel

$$u[f(p_1, \dots, p_n)] = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial p_j} \cdot C_{ij}}$$

mit $(C_{ij}) = \text{Kovarianzmatrix}$

$$u[p_i] = \sqrt{C_{ii}}$$

Testergebnisse: Uniaxiale Kriechversuche mit $\sigma_{dif} = 12 \text{ MPa}$, $\sigma_0 = 4 \text{ MPa}$



Parameter der 5 uniaxialen Kriechversuche mit $\sigma_{dif} = 12 \text{ MPa}$, $\sigma_0 = 4 \text{ MPa}$

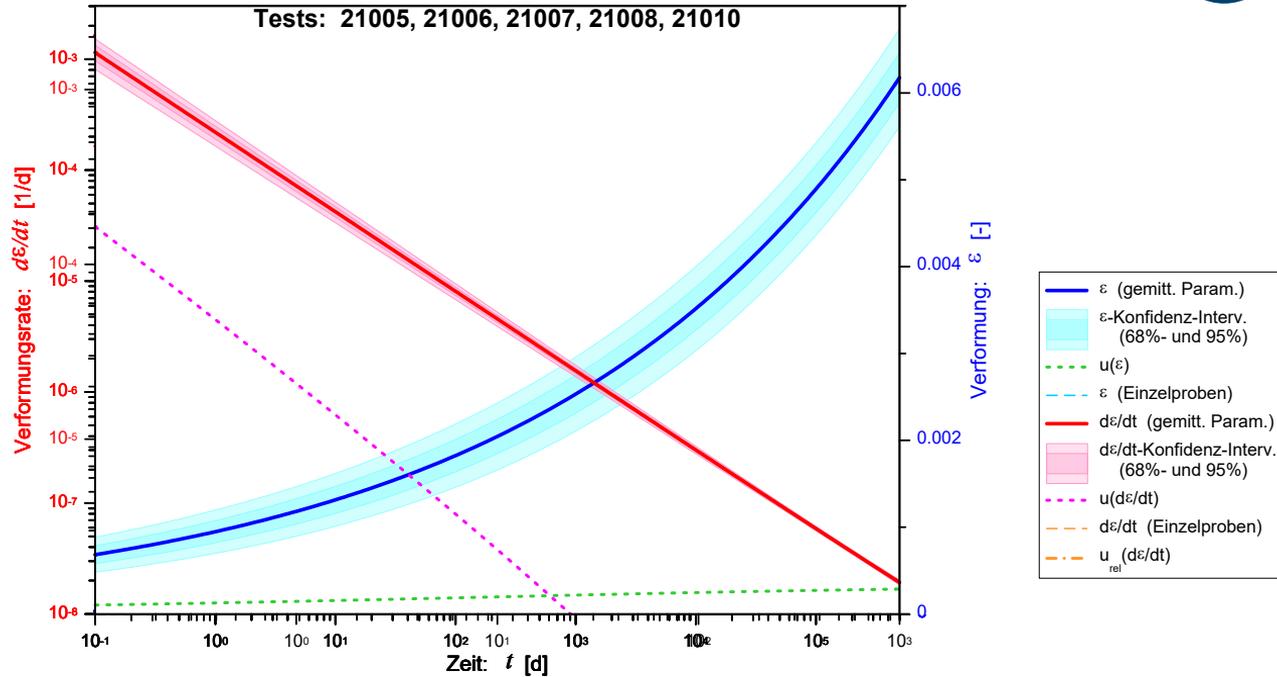
Die Unsicherheiten der Parameter sind für das Material viel größer als für die Einzelproben (für a um 2 Größenordnungen, für b und $\dot{\epsilon}_{stat}$ um $1\frac{1}{2}$ Größenordnungen)

	N4A/1-21007	N4A/2-21008	N4A/3-21006	N4A/4-21010	N4A/5-21005	Mittelwert
a	$2.8518 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$	$3.162 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$	$2.5787 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$	$2.1546 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$	$3.317 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$	$2.81 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$
b	-0.7616	-0.7900	-0.7498	-0.7235	-0.7847	-0.762
$\dot{\epsilon}_{stat}$	$2.2 \cdot 10^{-14} \text{ d}^{-1}$	$2.182 \cdot 10^{-7} \text{ d}^{-1}$	$3.6 \cdot 10^{-14} \text{ d}^{-1}$	$7.1 \cdot 10^{-11} \text{ d}^{-1}$	$7.69 \cdot 10^{-8} \text{ d}^{-1}$	$6 \cdot 10^{-8} \text{ d}^{-1}$
$u[a]$	$0.0023 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$	$0.003 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$	$0.0016 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$	$0.0009 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$	$0.003 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$	$0.21 \cdot 10^{-4} \text{ d}^{-1}$
$u[b]$	0.0004	0.0004	0.0003	0.0003	0.0004	0.012
$u[\dot{\epsilon}_{stat}]$	$2.2 \cdot 10^{-9} \text{ d}^{-1}$	$2.0 \cdot 10^{-9} \text{ d}^{-1}$	$1.7 \cdot 10^{-9} \text{ d}^{-1}$	$1.9 \cdot 10^{-9} \text{ d}^{-1}$	$2.4 \cdot 10^{-9} \text{ d}^{-1}$	$4 \cdot 10^{-8} \text{ d}^{-1}$

Kovarianzmatrix

	a	b	$\dot{\epsilon}_{stat}$
a	$4.325 \cdot 10^{-10}$	$-2.381 \cdot 10^{-7}$	$5.741 \cdot 10^{-13}$
b	$-2.472 \cdot 10^{-7}$	$1.415 \cdot 10^{-4}$	$-3.943 \cdot 10^{-10}$
$\dot{\epsilon}_{stat}$	$5.741 \cdot 10^{-13}$	$-3.798 \cdot 10^{-10}$	$1.805 \cdot 10^{-15}$

Testergebnisse: Uniaxiale Kriechversuche mit $\sigma_{dif} = 12 \text{ MPa}$, $\sigma_0 = 4 \text{ MPa}$



Parameterbestimmung des empirischen Modells:

Anpassung von $\varepsilon(t)$ oder $\dot{\varepsilon}(t)$?

Physikalisch sind die differenzierte Form $\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_{stat} + a \cdot (t - t_0)^b$

und die integrierte Modellformulierung $\varepsilon = \dot{\varepsilon}_{stat} \cdot (t - t_0) + \frac{a}{b+1} \cdot (t - t_0)^{b+1} + \varepsilon_0$ äquivalent

Für die Parameterbestimmung durch Anpassung des Modells an Daten gibt es dagegen grundlegende Unterschiede.

Parameterbestimmung des Modells : Anpassung von $\varepsilon(t)$ oder $\dot{\varepsilon}(t)$?

Anpassung der Verformungen ε

+ mathematisch einfache Anpassung:

$$\text{minimiert Zielfunktion } Z(\{p_j\}) = \sum_{\text{Messpunkte}} (\varepsilon_{\text{fit}}(t_i; \{p_j\}) - \varepsilon_{\text{obs}}(t_i))^2$$

+ Verformungen $\varepsilon(t_i)$ liegen direkt als Messdaten vor

- gibt wenig Rückmeldung über die Eignung des gewählten Modells,
z. B. liefert eine logarithmierte Ordinate im ε - t -Plot i. A. keine sinnvollen Informationen
- gibt wenig Rückmeldung über die Güte der Anpassungsergebnisse für späte Zeiten und Eignung zur Extrapolation
- bietet keine Möglichkeit einer Anpassung, die die relativen Fehler der Verformungsraten $\dot{\varepsilon}$ minimiert
- optimiert daher die Anpassung im Bereich hoher Verformungsraten $\dot{\varepsilon}$ d. h. am Beginn der Messreihe;
i. A. interessiert aber v. a. eine gute Anpassung für späte Zeiten (z. B. zur Abschätzung eines stationären KriechTerms)
- anfällig für mangelhafte Parameterbestimmungen durch (häufig vorkommendes) vom Modell abweichendes Probenverhalten in frühen Testphasen, ohne dass dies leicht erkennbar wäre

Parameterbestimmung des Modells : Anpassung von $\varepsilon(t)$ oder $\dot{\varepsilon}(t)$?

Anpassung der Verformungsraten $\dot{\varepsilon}$ bei Minimierung der relativen Fehler $1 - \dot{\varepsilon}_{obs} / \dot{\varepsilon}_{fit}$

- mathematisch schwierige Anpassung mit 2 Möglichkeiten:

1.) „Logarithmische“ Minimierung mit Zielfunktion
$$Z(\{p_j\}) = \sum_{\text{Messpunkte}} \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_{fit}(t_i; \{p_j\})}{\dot{\varepsilon}_{obs}(t_i)} \right)^2$$

(Probleme bei negativen $\dot{\varepsilon}_{obs}(t_i)$;

minimiert nur für kleine Streuung der Messdaten asymptotisch den relativen Fehler von $\dot{\varepsilon}$,
bei größerer Streuung systematische Unterschätzung von $\dot{\varepsilon}$)

2.) „Direkte“ Minimierung mit Zielfunktion
$$Z(\{p_j\}) = \sum_{\text{Messpunkte}} \left(1 - \frac{\dot{\varepsilon}_{obs}(t_i)}{\dot{\varepsilon}_{fit}(t_i; \{p_j\})} \right)^2$$

(kein gewöhnliches Kurvenanpassungs-Problem;

bei größerer Streuung systematische Überschätzung von $\dot{\varepsilon}$)

- Verformungsraten $\dot{\varepsilon}(t_i)$ sind nicht direkt gemessen;
ihre geeignete Berechnung aus den gemessenen Verformungen $\varepsilon(t_i)$ ist ein nicht triviales Problem,
ebenso ihre statistische Bewertung für die Unsicherheitsbestimmung

Parameterbestimmung des Modells : Anpassung von $\varepsilon(t)$ oder $\dot{\varepsilon}(t)$?

Anpassung der Verformungsraten $\dot{\varepsilon}$ bei Minimierung der relativen Fehler $1 - \dot{\varepsilon}_{obs} / \dot{\varepsilon}_{fit}$

...

- + gibt gute Kontrolle der Eignung des gewählten Modells,
z. B. liefert eine logarithmierte Ordinate im $\dot{\varepsilon}$ - t -Plot oft eine Entscheidung zwischen Exponential- und Potenz-Modellen
- + gibt gute Kontrolle der Güte der Anpassungsergebnisse (auch für späte Zeiten) und Eignung zur Extrapolation
- + optimiert die Anpassung auch im i. A. besonders interessierenden Bereich sehr niedriger Verformungsraten $\dot{\varepsilon}$,
d. h. am Ende der Messreihe
- + ermöglicht i. A. die Identifikation von Zeitabschnitten, für die das verwendete Modell nicht geeignet ist

Parameterbestimmung des Modells : Anpassung von $\varepsilon(t)$ oder $\dot{\varepsilon}(t)$?



Fazit:

- Theoretisch hat die Parameterbestimmung durch Anpassung der Verformungsraten $\dot{\varepsilon}$ viele Vorteile.
- Praktisch ist das Problem der Bereitstellung hinreichend guter $\dot{\varepsilon}$ -Daten noch nicht gut gelöst, ebenso einige mathematische Probleme der Anpassung durch Minimierung relativer Abweichungen.
- Daher zunächst Parameterbestimmung durch Anpassung der Verformung ε
- verbunden mit Nutzung von $\dot{\varepsilon}$ -Daten zu Kontrollzwecken, um die Schwächen der ε -Anpassung zu kompensieren

ε -Fits: Möglichkeiten , Komplikationen und Fallgruben

- Die Parameterbestimmung ist i. A. ein nichtlineares Anpassungs-Problem
 - ⇒ iterative Algorithmen erforderlich; diese benötigen Startwerte für die Parameter p_1, \dots, p_m
 - ⇒ ungünstige Wahl der Startwerte führt oft zu lokalen Minima der Zielfunktion, die so gefundene „Lösung“ ist nicht optimal und kann weit von der richtigen Lösung abweichen
- Auch ein für das Langzeitverhalten perfektes Modell beschreibt das Materialverhalten nicht in allen Versuchsphasen gut. Der Ausschluss der Daten solcher Phasen ist essentiell für den Erfolg. Abweichungen resultieren z. B. aus
 - nicht im Modell enthaltenen Prozessen, die wegen schnellem Abklingen nur in frühen Versuchsphasen relevant sind (z. B. ist ein Potenzmodell unmittelbar nach dem Prozess-Nullpunkt immer fehlerhaft, da es dort divergent ist)
 - Störungen im Versuchsablauf, z. B. Schwankungen der Randbedingungen $\sigma_{dif}, \sigma_0, T$;
 - ⇒ eine Korrektur der gemessenen ε -Werte auf elastische und thermische Verformungsanteile ist daher ratsam:

$$\varepsilon_{corr} = \varepsilon_{raw} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma_{dif}} \cdot (\sigma_{dif} - \sigma_{dif.soll}) - \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma_0} \cdot (\sigma_0 - \sigma_{0.soll}) - \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \cdot (T - T_{soll})$$

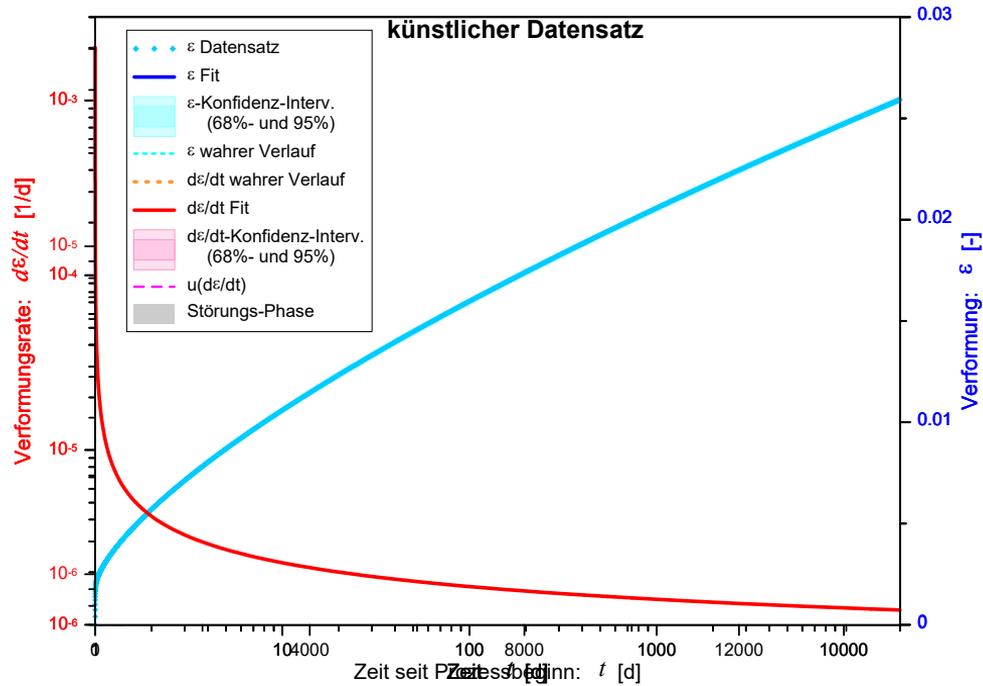
- ⇒ zur Bestimmung der elastischen und thermischen Parameter ist es günstig, nach Beendigung des Kriechversuchsentsprechende Variationen der Randbedingungen anzuschließen

ε -Fits: Möglichkeiten, Komplikationen und Fallgruben

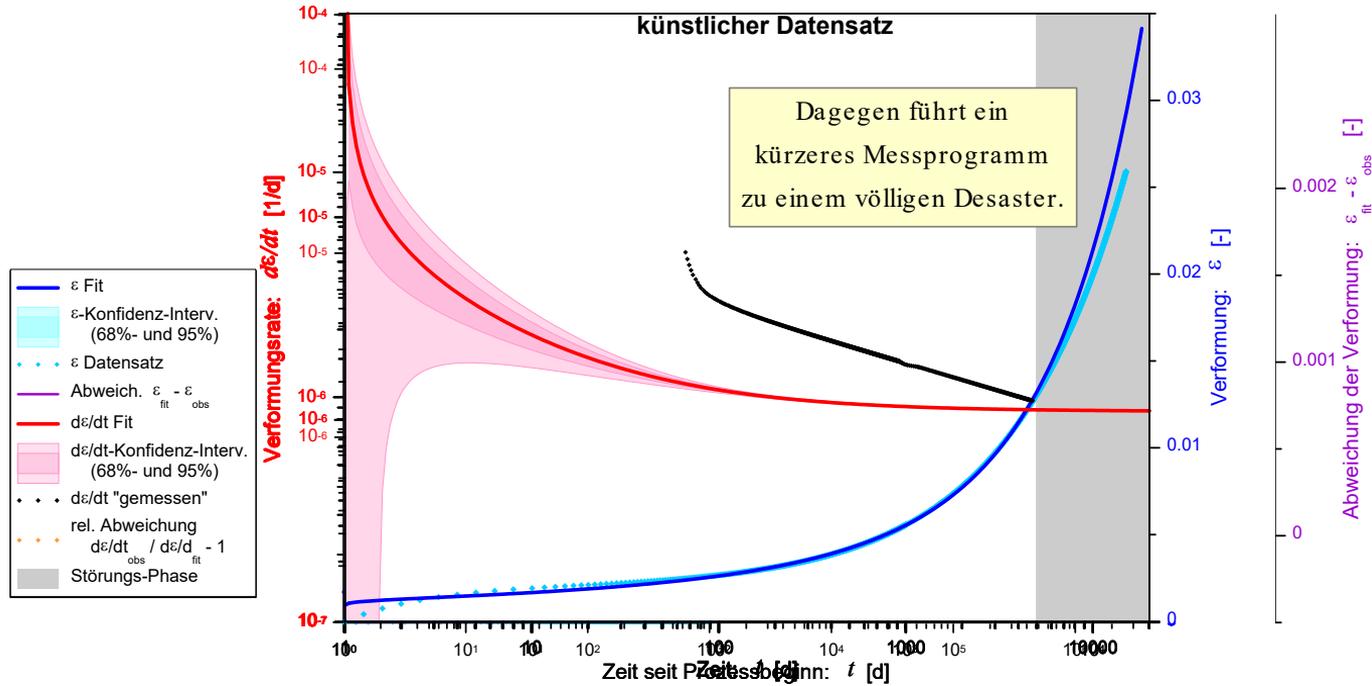
- Eine Anpassung von ε ermöglicht oft keine Identifikation erforderlicher Ausschlussphasen; hier ist die Nutzung belastbar berechneter $\dot{\varepsilon}$ -Werte hilfreich (ggf. unverzichtbar)
- Beispiel: Ein künstlicher Datensatz ohne statistische Messungenauigkeit, aber mit einem zusätzlichen nicht im Modell abgebildeten, schnell abklingenden Prozess und einem schwachen stationären Kriech-Term

$$\dot{\varepsilon} = 2 \cdot 10^{-5} \text{ d}^{-1} \cdot t^{-0.3} + 2 \cdot 10^{-3} \cdot t^{-2} + 10^{-10} \text{ d}^{-1}$$

ε -Fits: Möglichkeiten, Komplikationen und Fallgruben



ε -Fits: Möglichkeiten, Komplikationen und Fallgruben



Die Berechnung von Verformungsraten $\dot{\varepsilon}(t)$ aus gemessenen ε -Werten

- Verformungsraten werden i. A. als Steigung einer linearen Regression aus einer "geeigneten" Anzahl von $\varepsilon(t)$ -Messwerten berechnet.
- Problem: **Was ist eine "geeignete" Anzahl von Messwerten?**
 - zu wenige Werte \Rightarrow zu große Streuung der berechneten $\dot{\varepsilon}$ -Werte (ggf. bis hin zu negativen Werten)
 - zu viele Werte \Rightarrow "Verschmieren" des $\dot{\varepsilon}$ -Verlaufs und allgemeine Tendenz zur Überschätzung der Werte
 - die "geeignete" Anzahl variiert entlang des Messverlaufs (ggf. um mehrere Größenordnungen)
- Ziel: Bestimmung der "geeigneten" Anzahl so, dass die relative Unsicherheit $u_{rel}[\dot{\varepsilon}_{calc}]$ der berechneten $\dot{\varepsilon}$ -Werte näherungsweise konstant ist
- Dies ist möglich für "gute" Versuchsdaten, d. h. wenn die ε -Messung eine normalverteilte Unsicherheit mit konstanter Amplitude $u[\varepsilon]$ aufweist. Dann gilt für die ε -Messwerte $\varepsilon_{obs}(t) = \varepsilon_{true}(t) + u[\varepsilon] \cdot X$ wobei X eine standardnormalverteilte Zufallsvariable bezeichnet.

$$\dot{\varepsilon}(\bar{t}) = \frac{\sum_{i=1}^m (\varepsilon(t_i) - \bar{\varepsilon}) \cdot (t_i - \bar{t})}{\sum_{i=1}^m (t_i - \bar{t})^2}$$

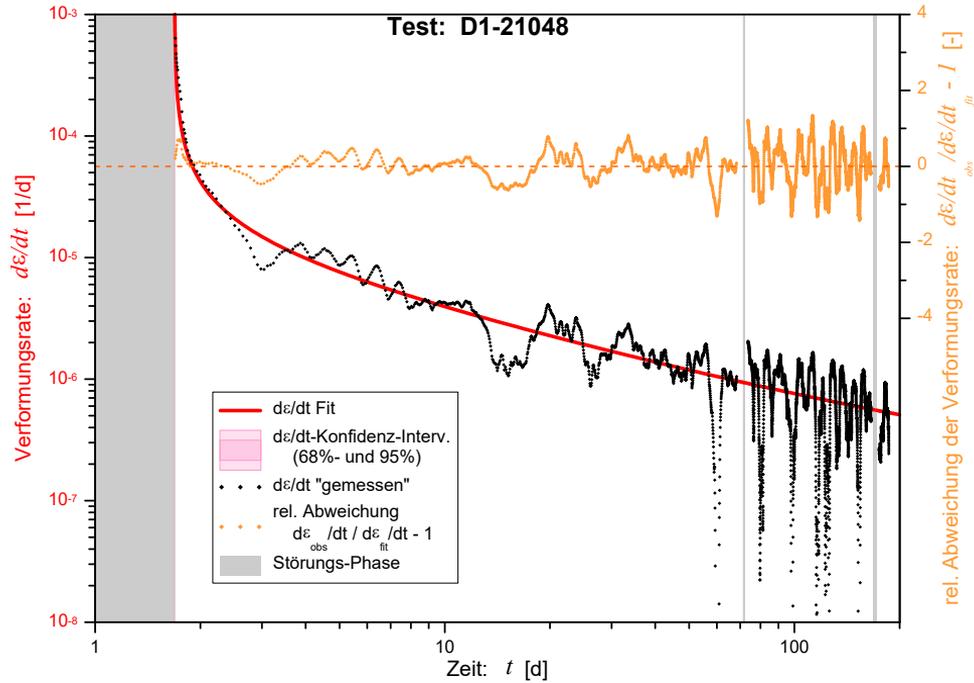
Die Berechnung von Verformungsraten $\dot{\varepsilon}(t)$ aus gemessenen ε -Werten

- Man kann zeigen, dass dann die Unsicherheit $u[\dot{\varepsilon}_{calc}]$ eines berechneten $\dot{\varepsilon}$ -Wertes gegeben ist durch

$$u[\dot{\varepsilon}_{calc}] = \frac{u[\varepsilon]}{\sum_{i=1}^m (t_i - \bar{t})^2} \Rightarrow u_{rel}[\dot{\varepsilon}_{calc}] = \frac{u[\dot{\varepsilon}_{calc}]}{\dot{\varepsilon}_{true}} = \frac{u[\varepsilon]}{\dot{\varepsilon}_{true}} \cdot \frac{1}{\sum_{i=1}^m (t_i - \bar{t})^2}$$

- Zu einer geforderten relativen Unsicherheit $u_{rel}^{max}[\dot{\varepsilon}_{calc}]$ gilt dann:
Für jede Berechnung eines $\dot{\varepsilon}$ -Wertes kann man die Zahl m der verwendeten $\varepsilon(t)$ -Messwerte so wählen, dass $u_{rel}[\dot{\varepsilon}_{calc}; m] \leq u_{rel}^{max}[\dot{\varepsilon}_{calc}]$ und zugleich $u_{rel}[\dot{\varepsilon}_{calc}; m-1] > u_{rel}^{max}[\dot{\varepsilon}_{calc}]$ gilt.
- Dabei muss eigentlich die wahre Verformungsrate $\dot{\varepsilon}_{true}$ bekannt sein.
Praktisch ist statt dessen der Schätzwert aus dem ε -Fit zu verwenden.
- Alle gezeigten "gemessenen" $\dot{\varepsilon}$ -Werte wurden durch dieses Verfahren mit einer geforderten relativen Unsicherheit $u_{rel}^{max}[\dot{\varepsilon}_{calc}] = 0.1$ bestimmt.

Die Berechnung von Verformungsraten $\dot{\varepsilon}(t)$ aus gemessenen ε -Werten



Zusammenfassung

- Die Zeitcharakteristik uni- und triaxialer Kriechversuche an M4-Salzbeton folgt einem Potenzgesetz
- Die Bestimmung der Materialparameter (incl. ihrer asymptot. Standardfehler) ist durch Anpassung an den ε -Datensatz möglich (Anpassung an $\dot{\varepsilon}$ -Daten wäre theoretisch besser, ist aber mathematisch noch nicht vollständig gelöst)
- Eine Hervorragende ε -Anpassung garantiert noch nicht eine gute Parameterbestimmung. Zur Kontrolle sollten vergleichende Betrachtungen der Güte der resultierenden $\dot{\varepsilon}$ -Funktion erfolgen, die die Identifikation gestörter bzw. nicht vom Modell beschriebener Versuchsabschnitte ermöglichen.
- Für die Berechnung von $\dot{\varepsilon}$ -Werten aus ε -Datensätzen wurde ein Verfahren gezeigt, dass für normalverteilte Unsicherheiten der ε -Messung die Einhaltung einer vorgegebenen relativen Unsicherheit erlaubt

Vielen Dank für die Aufmerksamkeit !

2.13

N. Müller-Hoeppe: **Zusammenfassung der Erfahrungen aus dem Barrierebau mit abbindenden Baustoffen – „Lessons Learnt“**



EINLEITUNG



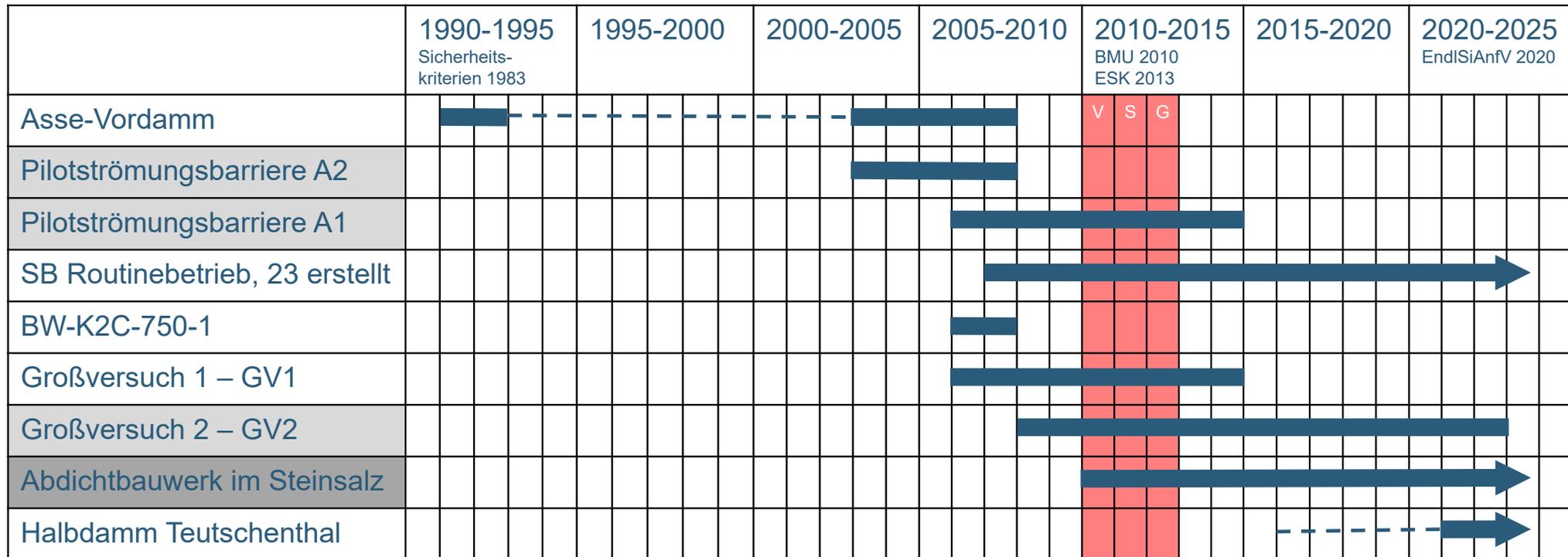
Praktische Erfahrungen aus dem Barrierenbau mit abbindenden Baustoffen – „Lessons Learnt“

- Beispiele beschränken sich auf mit Salzlösung belastete söhlige Pilotbauwerke
- Messsensoren liefer(te)n Daten zur Überprüfung bestehender Modellvorstellungen
- Modellvorstellungen wurden bestätigt oder mussten verworfen werden, i. S. „Lessons Learnt“
- Zeitpunkt der Druckbeaufschlagung mit Lösung ist entscheidend für die aufeinander aufbauenden „Lessons Learnt“ (Reihenfolge der Darstellung)

Messdaten aus Pilotbauwerken liefern keine Information zur Langzeitbeständigkeit

- Für Langzeitbeständigkeit wird nach Art des Bindemittels unterschieden
 - Zement – Sole- oder Salzbeton (bzw. Mörtel)
 - Magnesiumoxid – Sorelbaustoffe mit Salz- bzw. silikatischem Zuschlag

SÖHLIGE BARRIEREBAUWERKE IM SALZ – ZEITLICHE EINORDNUNG



LESSONS LEARNT

Sukzessiver
Erfahrungsgewinn an den
Pilotbauwerken

01

PILOTBAUWERKE AUS ORTBETON –
HYDROMECHANISCHES VERHALTEN

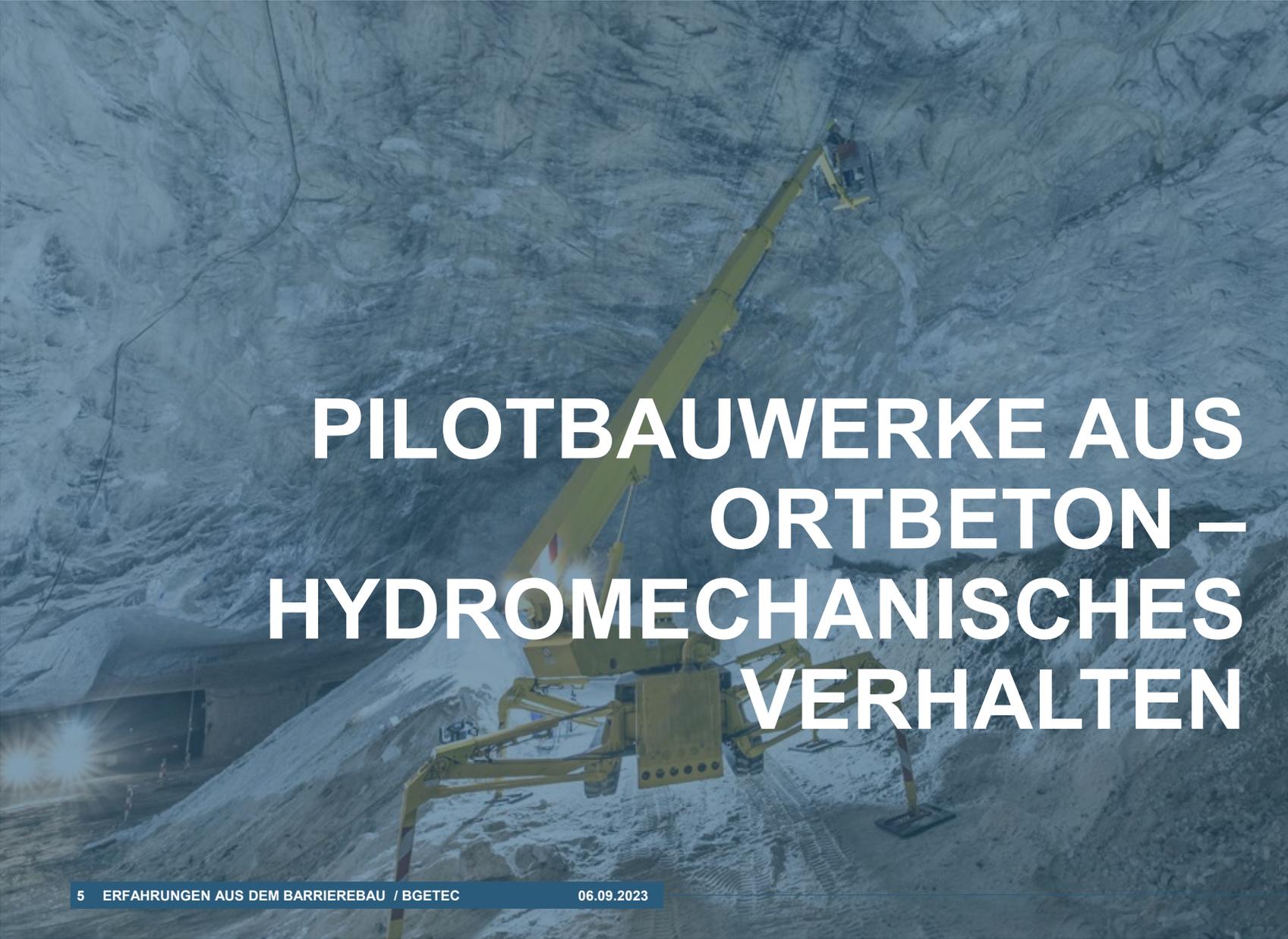
02

PILOTBAUWERK AUS SPRITZBETON –
LANGZEITBESTÄNDIGKEIT / BAUSTOFFKORROSION

03

ZUSAMMENFASSUNG



A large yellow crane is positioned on a concrete structure within a tunnel. The crane's long boom extends upwards, reaching towards a high, textured concrete ceiling. The scene is dimly lit, with a bright light source on the left creating a lens flare. The overall atmosphere is industrial and technical.

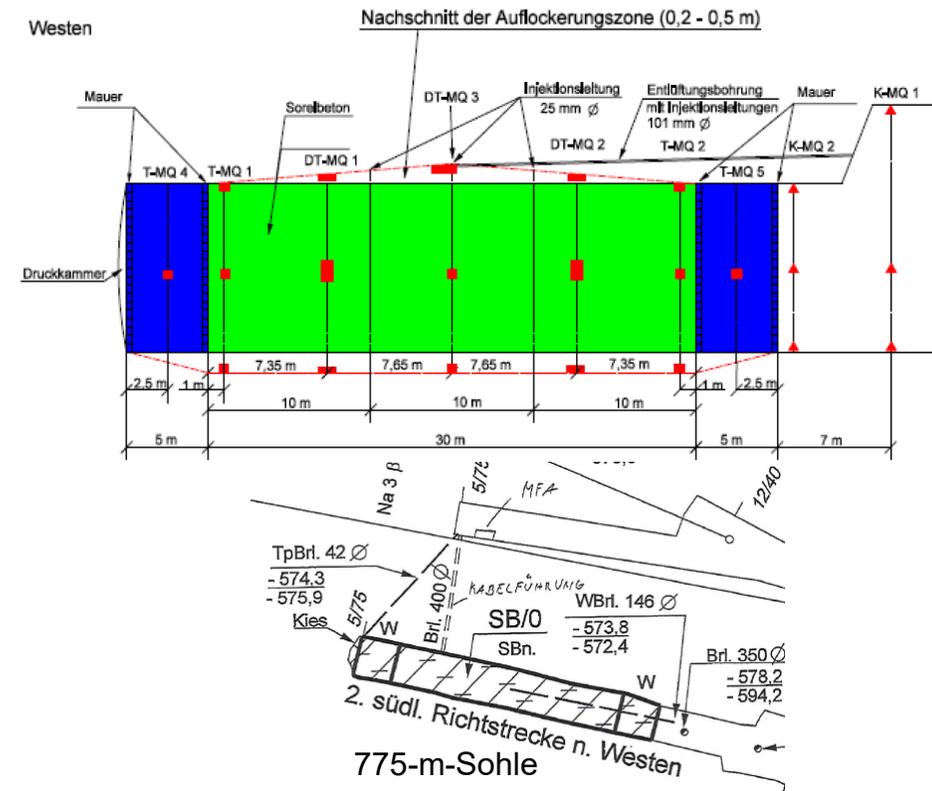
PILOTBAUWERKE AUS ORTBETON – HYDROMECHANISCHES VERHALTEN

01

PILOTSTRÖMUNGSBARRIERE A2 (PSB A2)

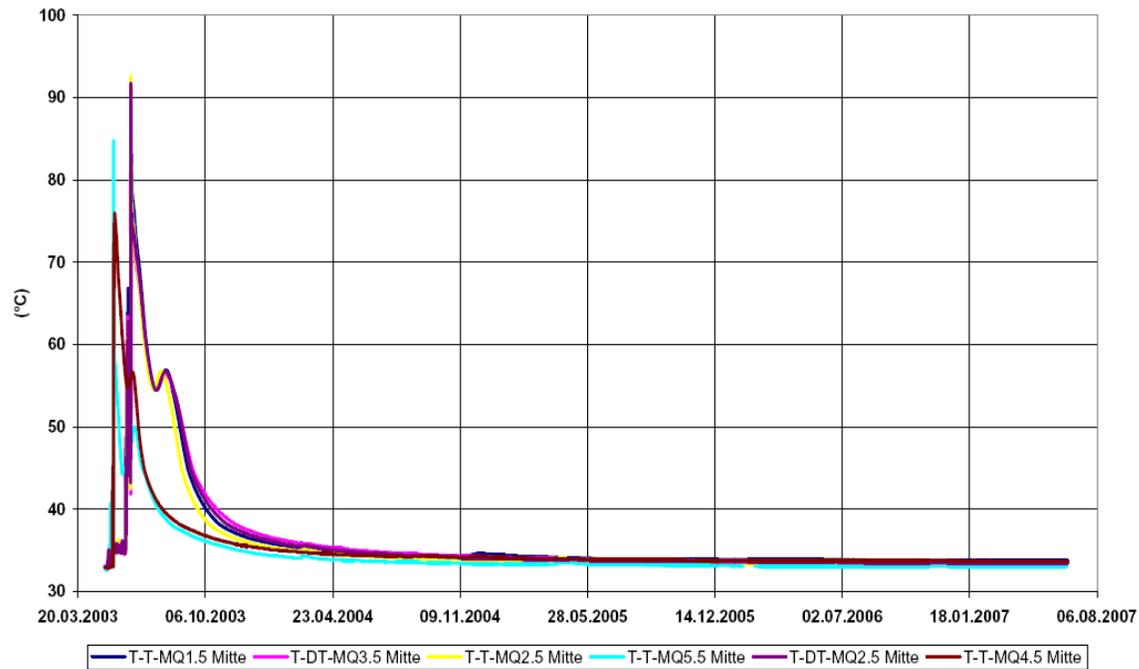
Errichtung 2002/03

- Auf Basis bergmännischer Erfahrung (= Arbeitssicherheit) wurde die ALZ kurz vor Betonage von Widerlager und Kernbarriere nachgeschnitten
- Die Firste wurde angeschrägt, um die Anbindung des Baukörpers zu gewährleisten
- Installation von Messsensoren – Temperatur und totale Spannungen
- Für den Baukörper kam der geringpermeable, aber vergleichsweise weiche Sorelbeton 29.6 A2 zum Einsatz, um potenziell risserzeugende Spannungsspitzen zu vermeiden



PSB A2 – BAUPHASE UND TEMPERATURENTWICKLUNG IM MESSZEITRAUM

PSB A2 Mitte - gesamte Temperaturentwicklung

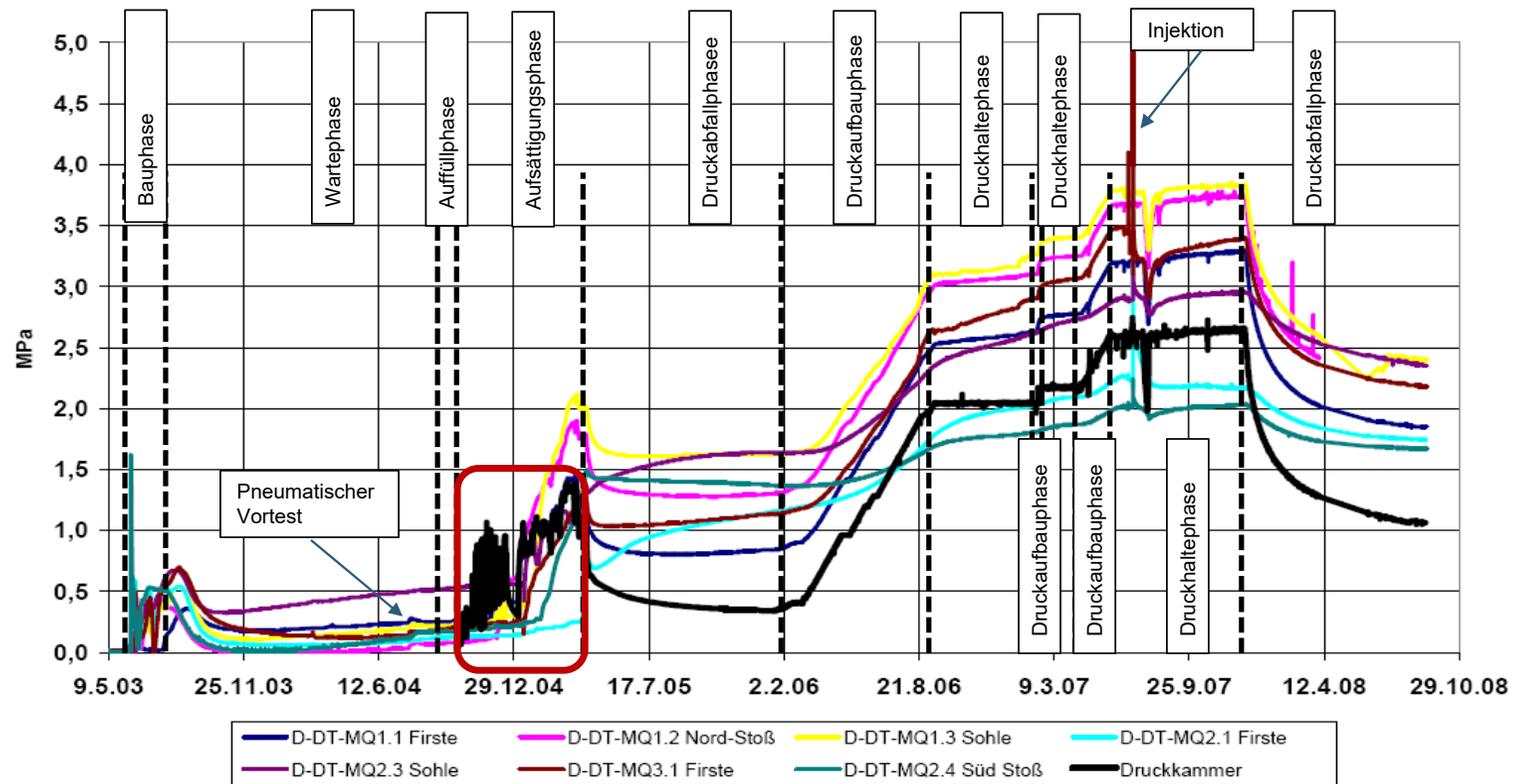


PSB A2 – DRUCKBEAUFSCHLAGUNGSPHASE

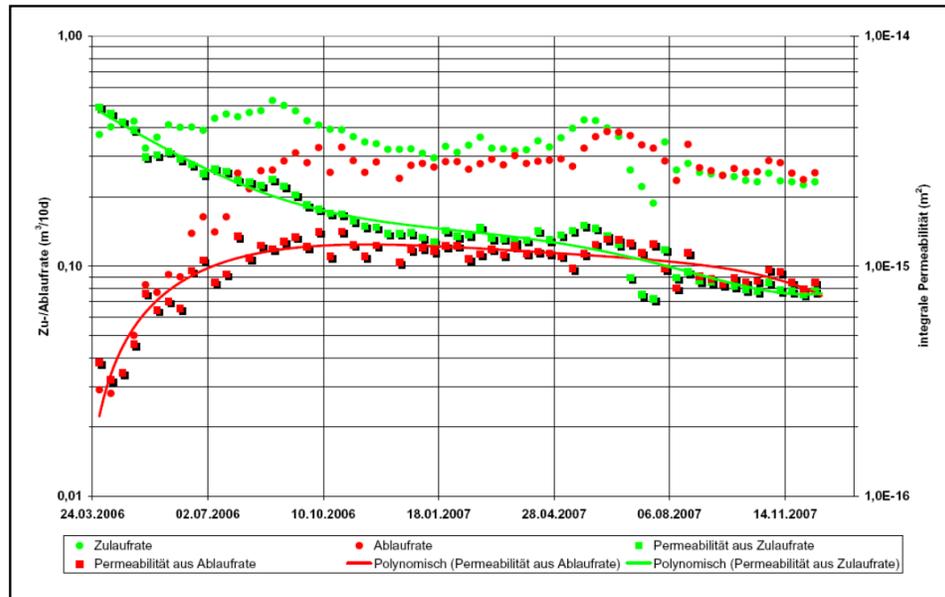


BUNDESGESELLSCHAFT
FÜR ENDLAGERUNG

BGE TECHNOLOGY GmbH



PSB A2 – INTEGRALE PERMEABILITÄT



„Lessons Learnt“

Kein Nachschnitt der ALZ nach bergmännischer Erfahrung

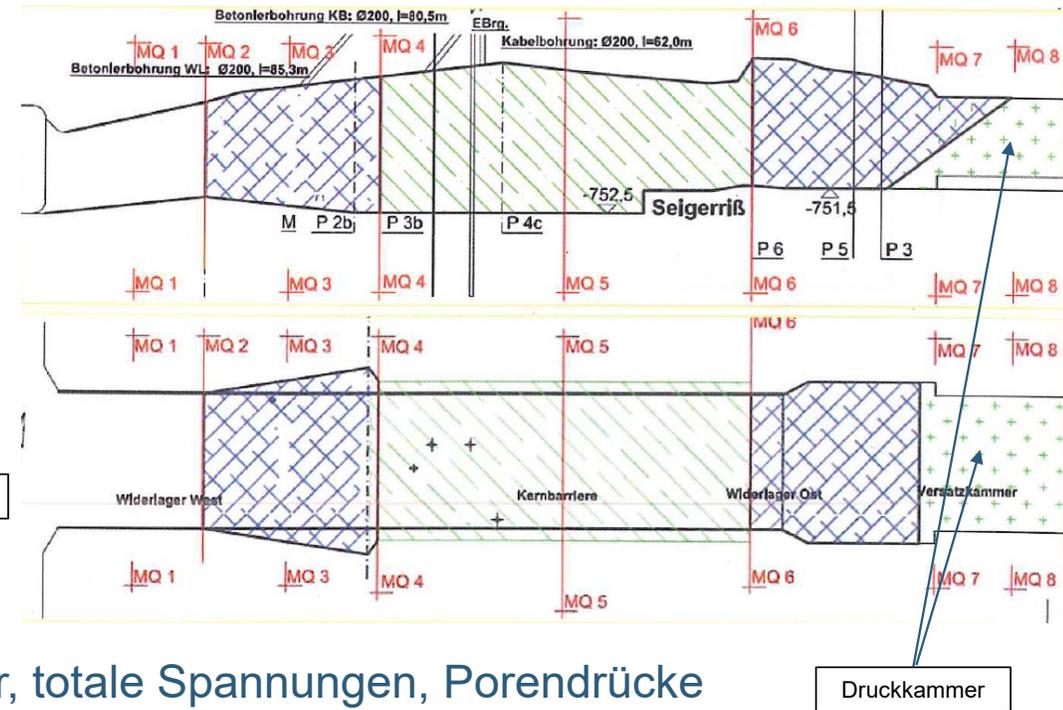
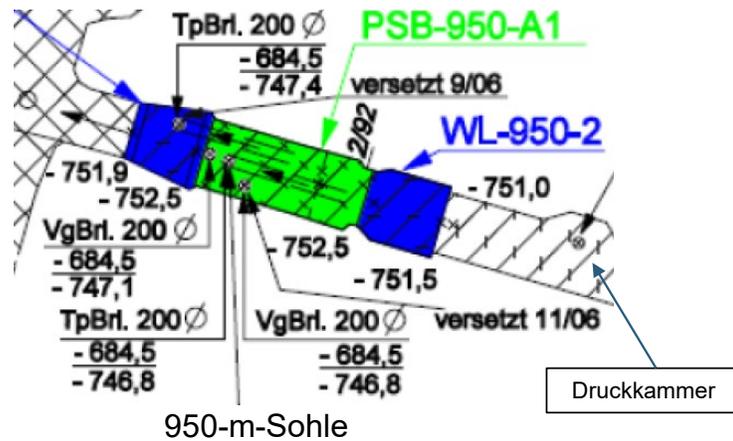
- Nachschnitt auf Basis vorlaufender Messungen

„Weicher“ Baustoff war ungeeignet

- ALZ war der maßgebliche Transportpfad
- Wahl geringpermeabler und „steifer“ Baustoffe

PILOTSTRÖMUNGSBARRIERE A1 (PSB A1)

Errichtung 2006 - verbesserte Konstruktion

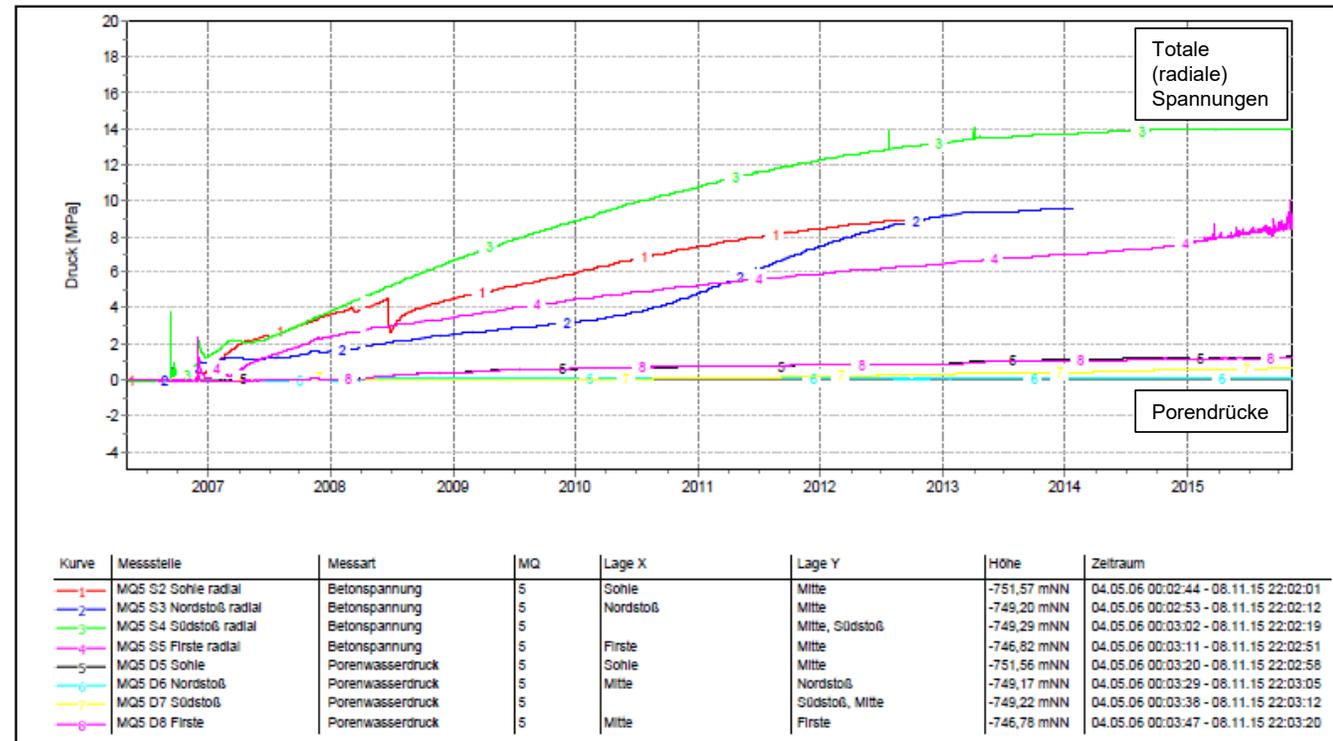


- Nachschnitt auf Basis von Messwerten
- Installation von Messsensoren – Temperatur, totale Spannungen, Porendrücke
- Wahl des geringpermeablen und „steifen“ Sorelbetons A1 für den Baukörper

PSB A1 – DRUCKBEAUFSCHLAGUNGSPHASE



- Die Wahl eines „steifen“ Baustoffes beschleunigte den Gebirgsdruckaufbau
- Die Porendrücke blieben ständig unter den totalen Radialspannungen → Einhaltung Fluiddruckkriterium
- Keine Druckabfälle über die Zeit
- PSB A1 ist geringer permeabel als die PSB A2



„Lesson Learnt“

Ständige Einhaltung des Fluiddruckkriteriums verhindert ALZ-Transport bei adäquatem Nachschnitt

ERAM - IN SITU-VERSUCH „ABDICHTBAUWERK IM STEINSALZ“ – SALZBETON

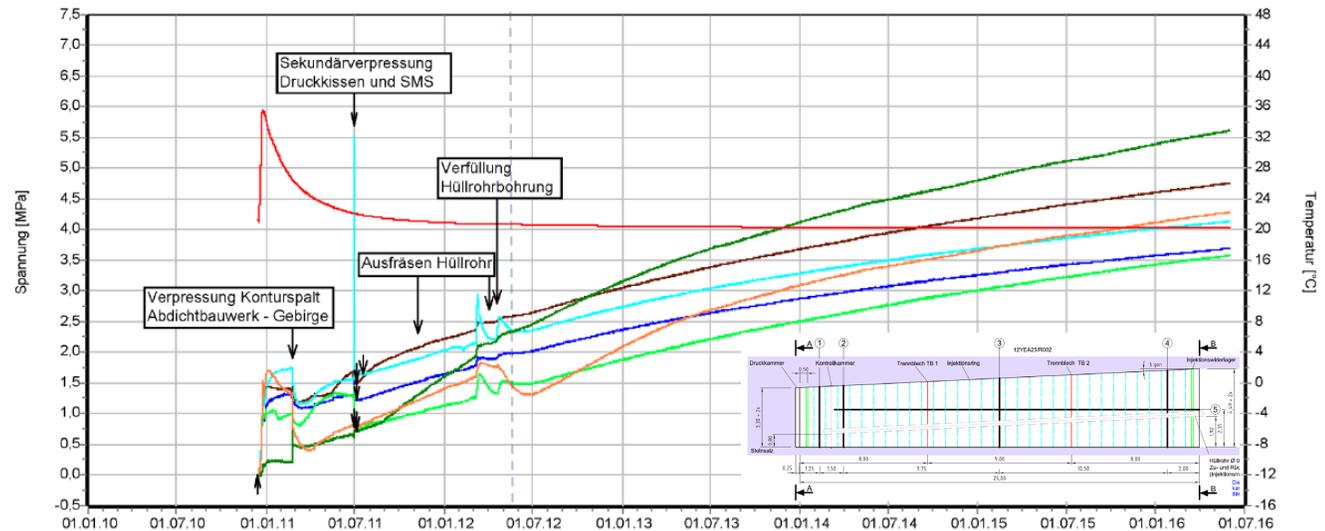


Errichtung 2010

Vorgabe für Druckbeaufschlagung: Lösungsdruck in Druckkammer < totale Radialspannungen!



2. Sohle Bartensleben
(ca. 410 m Teufe)

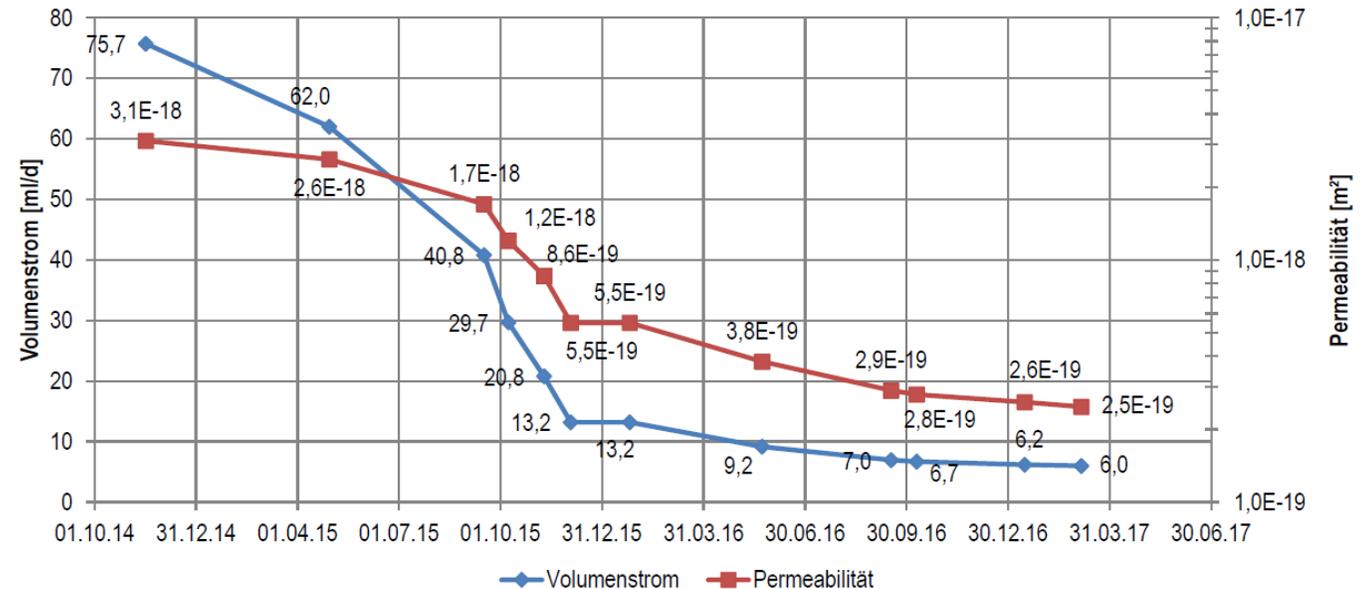


Messlokation	Grubenraum	Bohrung	Messstelle	Kurve	Messsystem	Position	Messrichtung [gon]	Messneigung [gon]	Höhe [m(N)]	Bezugsmessung
MQ3	12YEA25/R002		12-CP003L-B01	—	Spannung		367	0	-278,39	15.12.2010
MQ3	12YEA25/R002		12-CP003L-B06	—	Spannung		368	0	-280,23	15.12.2010
MQ3	12YEA25/R002		12-CP003L-B03	—	Spannung		170	0	-278,39	15.12.2010
MQ3	12YEA25/R002		12-CP003L-B04	—	Spannung		170	0	-280,21	15.12.2010
MQ3	12YEA25/R002		12-CP003L-B02	—	Spannung		270	97	-276,87	15.12.2010
MQ3	12YEA25/R002		12-CP003L-B05	—	Spannung		0	-100	-281,23	15.12.2010
MQ3	12YEA25/R002		12-CT003L-B01	—	Temperatur		~	~	-278,39	15.12.2010

ERAM „ABDICHTBAUWERK IM STEINSALZ“ – INTEGRALE PERMEABILITÄT

Porendruck wurde unterhalb
des Radialspannungsniveaus
gehalten

- Kein Durchtritt von Lösung
an der Luftseite
- Ermittlung der integralen
Permeabilität erfolgte über
die Ablafrate



Schlussfolgerung

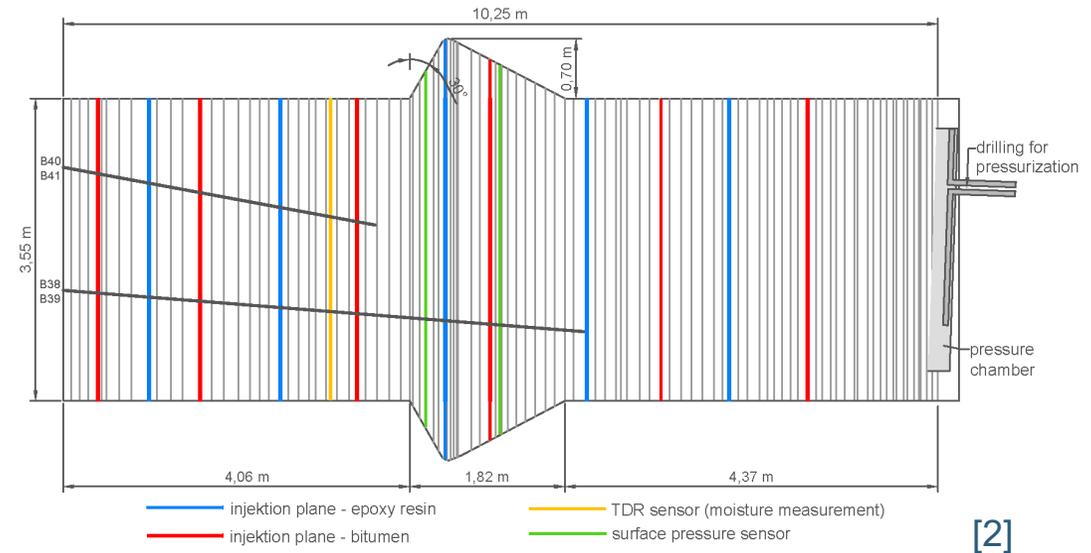
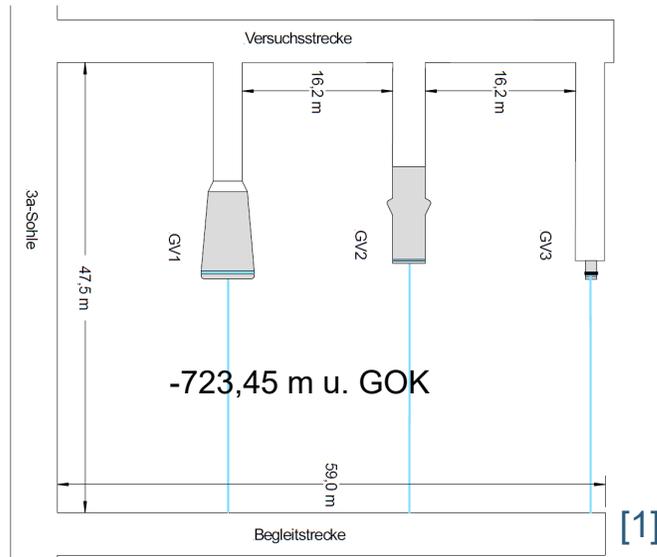
An Standorten im Steinsalz ist der Bau dichter Abdichtbauwerke aus abbindendem Baustoff möglich



**PILOTBAUWERK AUS
SPRITZBETON
LANGZEITBESTÄNDIGKEIT /
BAUSTOFFKORROSION**

02

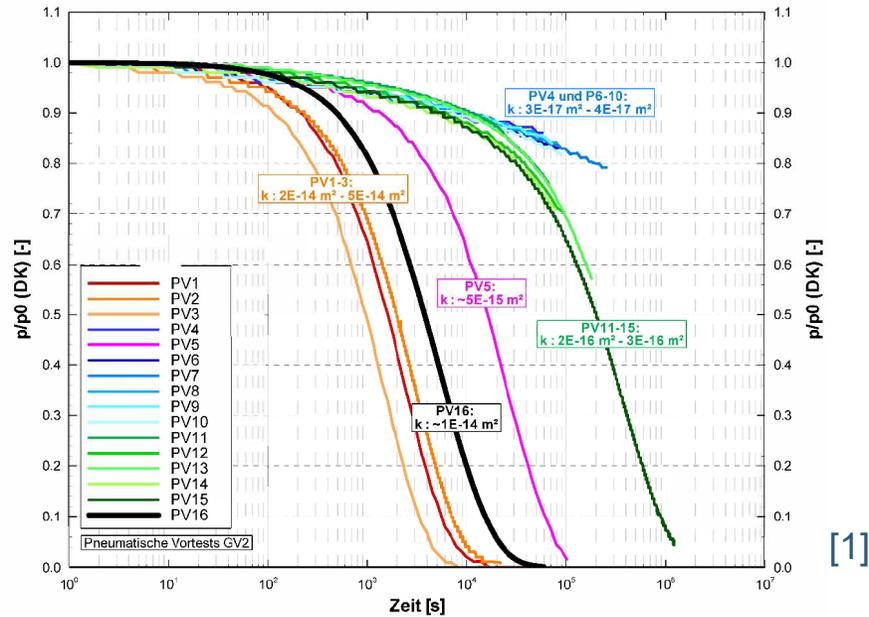
TEUTSCHENTHAL – GROßVERSUCH 2 (GV2)



Standortlokation im Carnallitit – Begrenzung der Temperatur an der Wirtsgesteinskontur notwendig

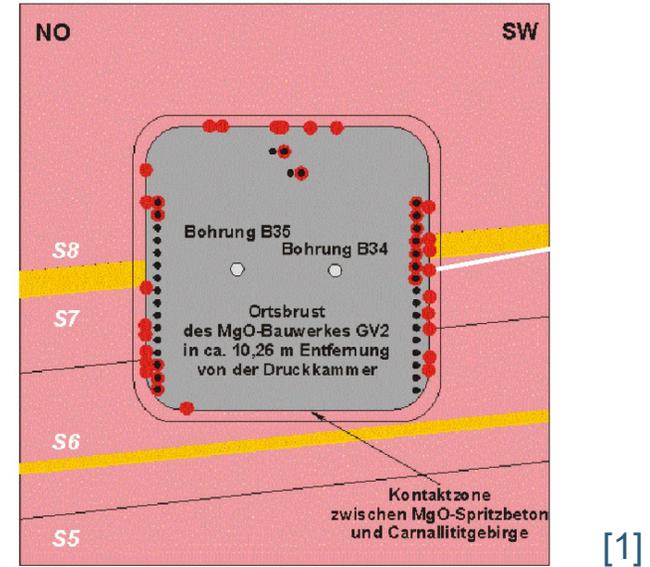
- Sorelspritzbeton
- Betonierabschnittsgrenzen des Sorelspritzbetons sind konstruktiv bedingt
- Gezielte Untersuchung der Betonierabschnittsgrenzen (BAG)

GV2 – PNEUMATISCHE VORTESTS



Ergebnisse pneumatischer Vortests

[1]



Legende

- Kaliflöz Staßfurt (K2), mittlerer Lagerteil
- stark auswitternde, tachyhydritreiche Zonen
- Punktmessung => hohe Tracergaskonzentration
- Leitungen mit Randumläufigkeiten (Tracergas)
- Leitungen ohne Randumläufigkeiten

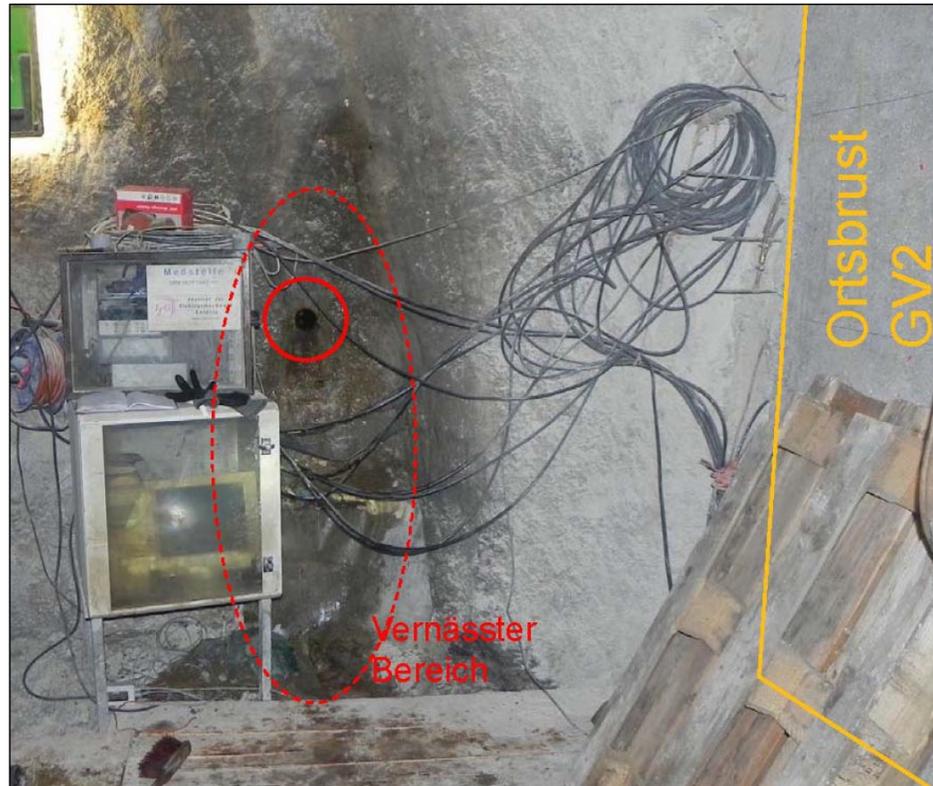
[1]

Austritt von Tracergas im PV16

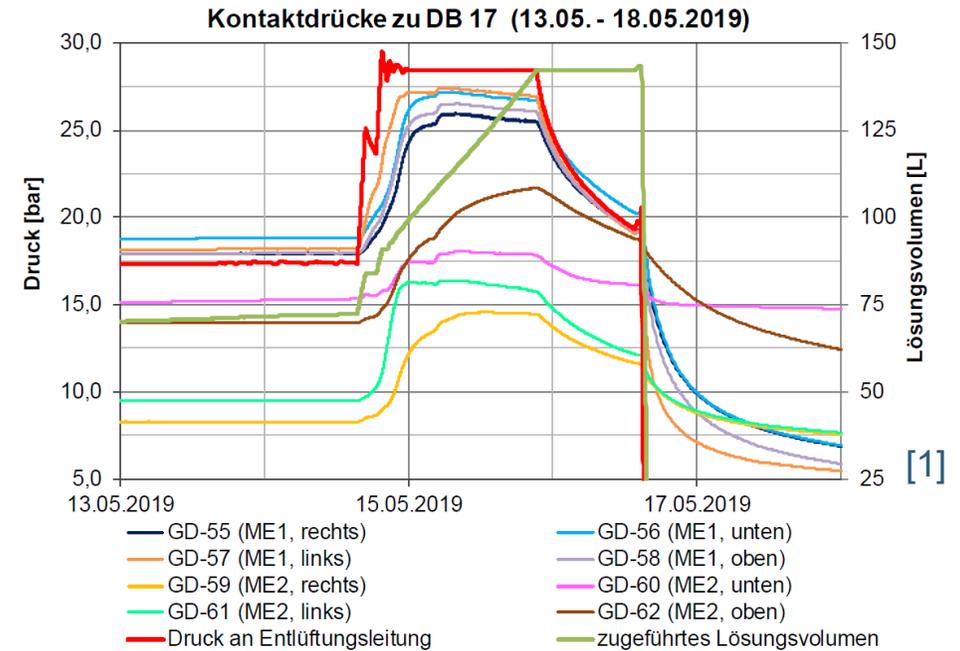
„Lesson Learnt“

Standorte von Barrierebauwerken im Carnallit vermeiden!

GV2 – DRUCKBEAUFSCHLAGUNGSPHASE 17



[1]



Integrale Permeabilität wurde nicht ermittelt

LANGZEITBESTÄNDIGKEIT – KORROSION VON SALZ- UND SORELBETON

Korrodiierende Lösungen

- Salzbeton: NaCl-gesättigte, MgCl₂-reiche Lösungen
- Sorelbeton: NaCl-gesättigte, MgCl₂-arme Lösungen

Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens

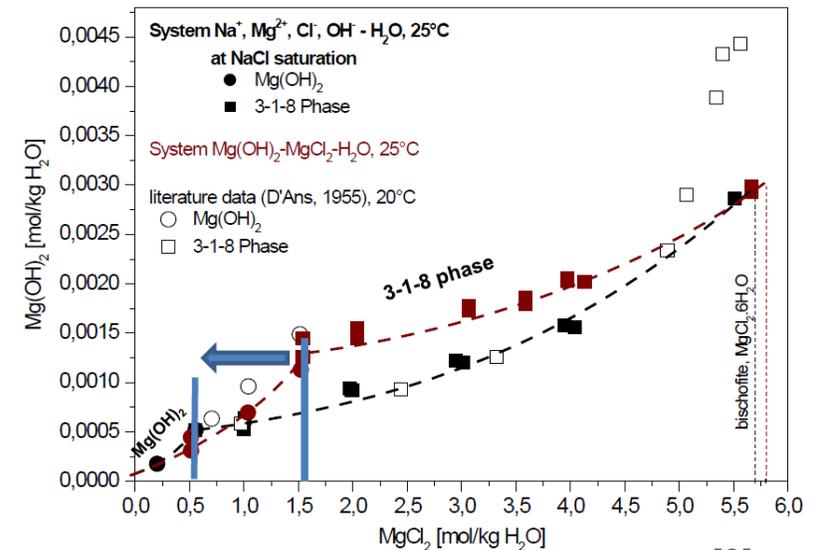
- Die Aufsättigung von Zutrittslösungen erfolgt von NaCl → MgCl₂
- Das Auftreten von MgCl₂-reicher Lösung bei söhlichen Barrieren langfristig wahrscheinlicher

Korrosionspotenzial

- Die Stabilität von Sorelbeton (3-1-8 Phase, 25°C) ist bereits bei 0,5 mol Mg²⁺/kg H₂O gegeben (MgCl₂-Teilsättigung)

- Korrosion einer Sorelbetonbarriere ist weniger wahrscheinlich als die einer Salzbetonbarriere, aber Ungewissheit „lokalierte Korrosion“

... System Na⁺, Mg²⁺, Cl⁻, OH⁻ - H₂O at 25°C

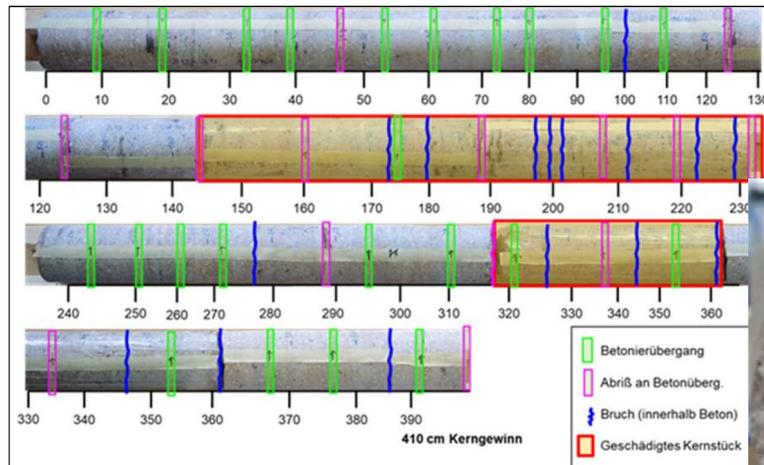


[3]

LANGZEITBESTÄNDIGKEIT – UNGEWISSHEIT LOKALISIERTE KORROSION

Identifikation potenzieller Schwächezonen mit höherer Permeabilität

(1) Betonierabschnittsgrenzen/Betonierfugen – konstruktiv bedingt oder ungeplant durch längere Betonageunterbrechungen

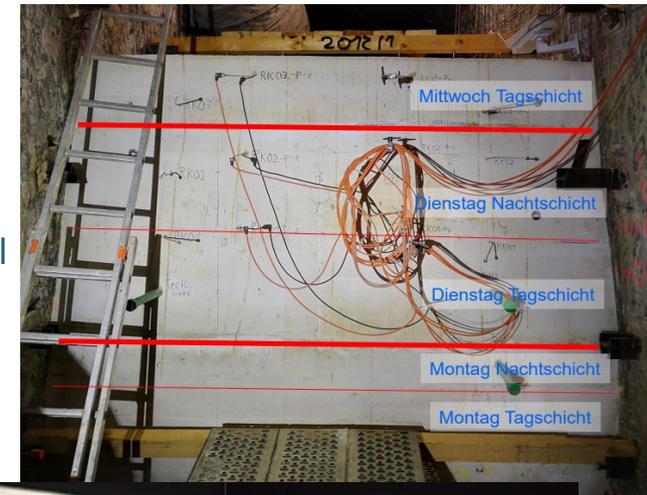


Großversuch 2 (GV2)



[1]

Halbdamm
Teutschenthal



[4]

GV2 – LÖSUNGSPERMEABILITÄT (BOHRLOCHMESSUNGEN)

Bohrung 38 (NaCl-Lsg.)			Bohrung 39 (MgCl ₂ -Lsg.)		
Lösungspерmeabilität [m ²]			Lösungspерmeabilität [m ²]		
Datum	BL	BAG /2cm	Datum	BL	BAG /2cm
23.06.16	1,7E-15	4,1E-13	23.06.16	3,6E-16	8,1E-14
12.01.17	9,8E-18	2,4E-15	11.03.17	1,7E-19	3,8E-17
15.08.17	1,5E-18	3,6E-16	15.08.17	1,5E-18	3,0E-16
15.10.17	5,4E-19	1,6E-16	15.10.17	3,4E-19	8,5E-17
29.01.18	-	-	29.01.18	1,2E-19	3,6E-17
19.07.18	2,8E-19	9,6E-17	19.07.18	5,4E-20	1,9E-17
23.08.18	8,2E-20	2,8E-17	23.08.18	2,5E-20	4,0E-18
25.10.18	4,3E-19	1,5E-16	25.10.18	4,9E-20	1,7E-17
17.01.19	2,8E-20	9,6E-18	17.01.19	7,5E-20	2,6E-17



(Vorläufige) Schlussfolgerung

Betonierabschnittsgrenzen, Betonierfugen stellen keine maßgeblichen Schwächezonen dar, aber

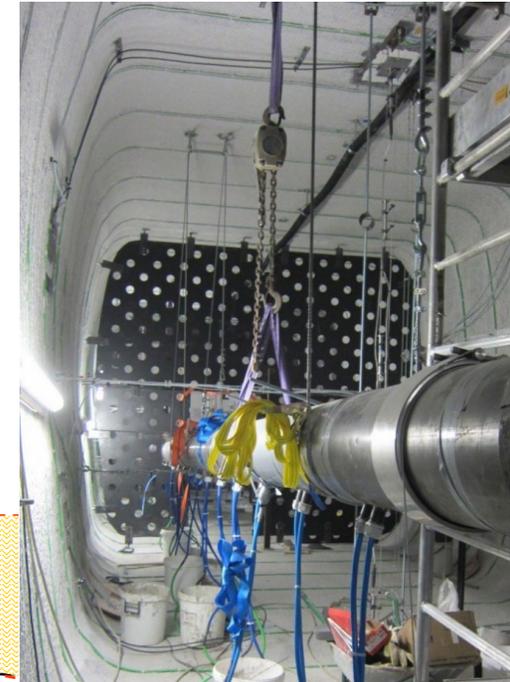
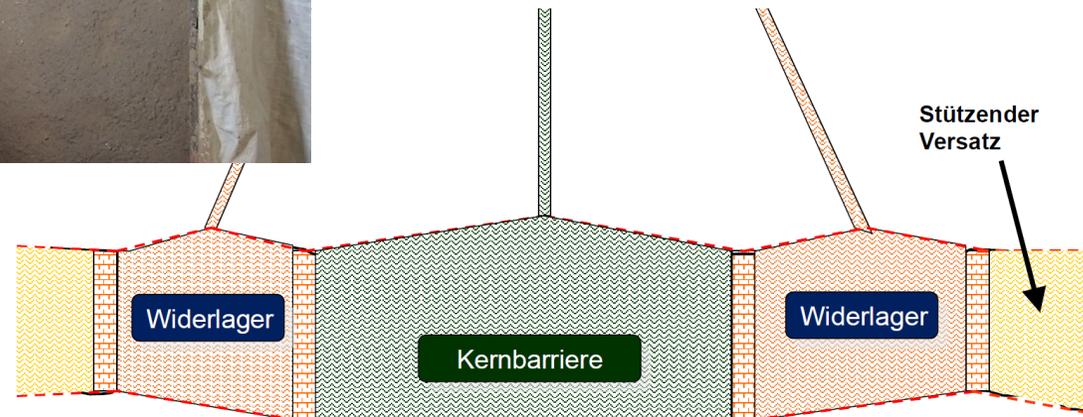
- Empfehlung: Bei ungeplanten Betonierfugen Analyse/Abweichungsbewertung durchführen

LANGZEITBESTÄNDIGKEIT – UNGEWISSHEIT LOKALISIERTE KORROSION

Konstruktive / betontechnologische Maßnahmen - Vermeidung, Minimierung von Trennrissen
Temperaturbegrenzung, Einspannung / Schaffung von Sollbruchstellen für Trennrisse

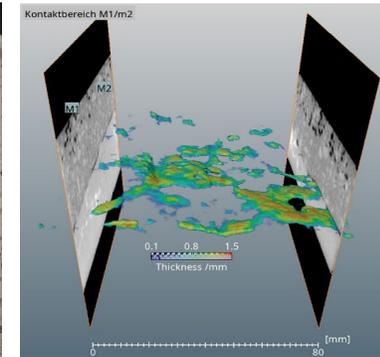
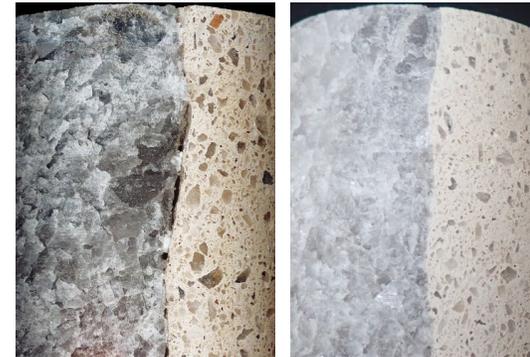
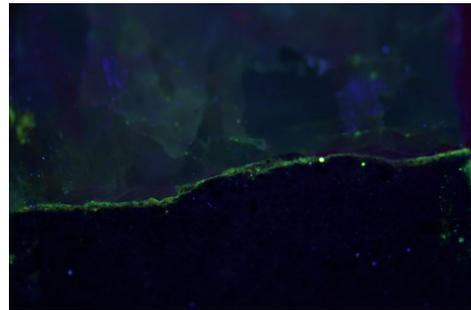


[2]



LANGZEITBESTÄNDIGKEIT – UNGEWISSHEIT LOKALISIERTE KORROSION

Identifikation potenzieller Schwächezonen mit höherer Permeabilität
(3) Kontaktzone zwischen Baukörper und Wirtsgestein Steinsalz



ERAM - Abdichtbauwerk im Steinsalz

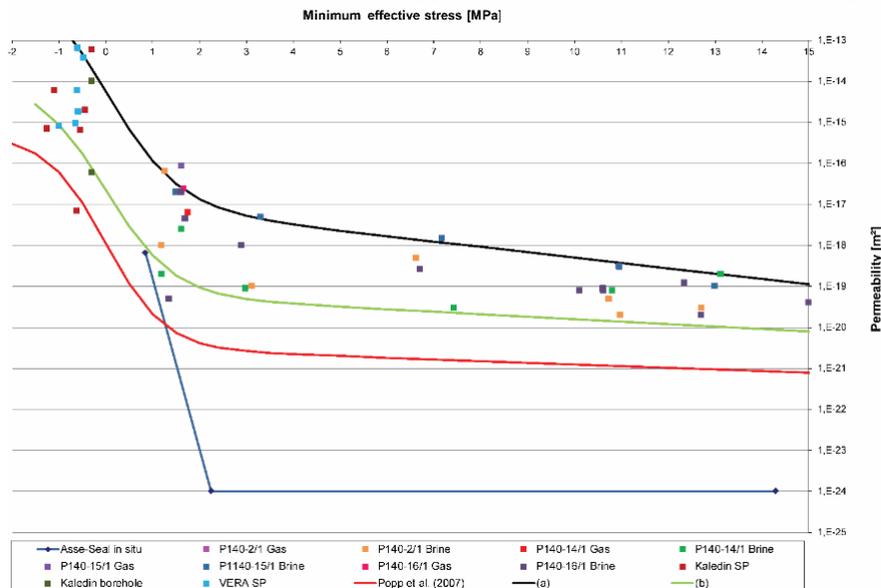
Halbdamm Teutschenthal

[4]

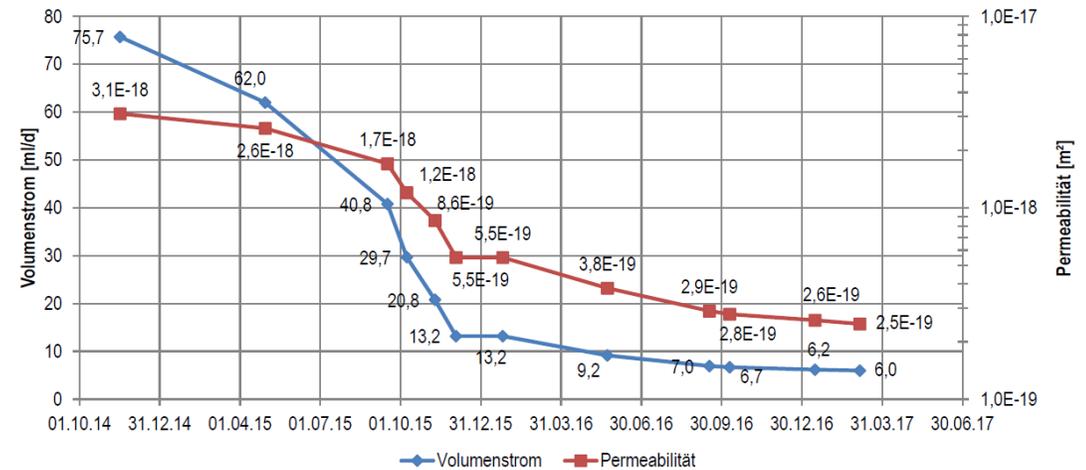
LANGZEITBESTÄNDIGKEIT – UNGEWISSHEIT LOKALISIERTE KORROSION

Abdichtung der Kontaktzone durch Aufkriechen des Salzgebirges – Einhalten Fluiddruckkriterium

➤ Für Salzbeton belegt, für Sorelbeton exemplarische Werte vorhanden



Labor- und in situ-Messwerte im Steinsalz



ERAM - Abdichtbauwerk im Steinsalz

Schlussfolgerung

An Standorten im Steinsalz ist der Bau dichter und langzeitbeständiger Barrieren aus Sorelbeton möglich



ZUSAMMENFASSUNG

03

ZUSAMMENFASSUNG DER ERFAHRUNGEN UND SCHLUSSFOLGERUNGEN



Die Erfahrungen an Pilotbauwerken zeigen, dass dichte und langzeitbeständige Abdichtbauwerke im Steinsalz errichtet werden können, wenn

- Die ALZ auf Basis von Messdaten entfernt wird
- Die durchgehende Anbindung von Salzkontur und Baukörper erreicht wird
- Das Fluidruckkriteriums in ALZ und Kontaktzone eingehalten wird → der Gebirgsdruckaufbau in ALZ und Kontaktzone wird durch einen Baukörper mit adäquater „Steifigkeit“ beschleunigt
- Ein gegen korrosiven Angriff möglichst robuster Baustoff – Sorelbeton - gewählt wird
- Schwächezonen erhöhter Permeabilität vermieden oder konstruktiv beherrscht werden, um lokalisierte Korrosion zu beschränken

Der Routinebetrieb beim Bau von Strömungsbarrieren in der Schachanlage Asse zeigt, dass der Bau von Barrierbauwerken aus Sorelbeton in Ortbetonbauweise nunmehr Stand der Technik ist

DANKSAGUNG



Für die langjährige Zusammenarbeit über mehr als 30 Jahre möchte ich mich bedanken bei ...

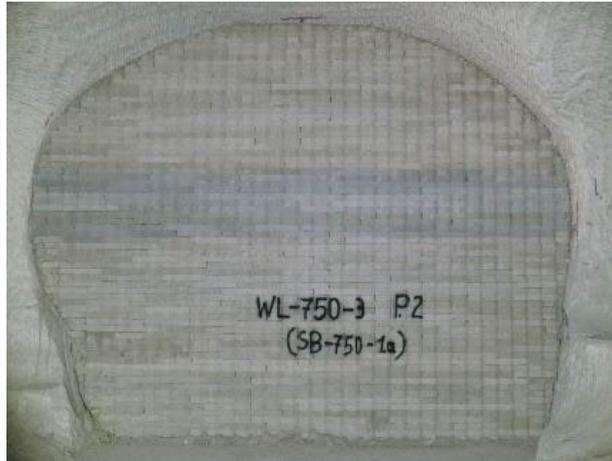
den Kolleginnen und Kollegen der BGE und BGETEC (früher GSF, HMGU, Asse GmbH, BfS, DBE, DBETEC) ...

den Partnern aus den Forschungseinrichtungen TU Clausthal, TU Bergakademie Freiberg, TU Braunschweig, GRS-Braunschweig (früher GSF), Helmholtzzentrum Rossendorf für ihren wissenschaftlichen Input ...

den Auftragnehmern IBeWa, K-UTECH, GmuG, IfG, TS-Bau für ihre zielorientierte, praktische Umsetzung und ...

BMBF, BMWi, BMUV für die finanzielle Förderung der Projekte

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!



LITERATUR



[1] Kudla, W.; Arendt, J.; Freyer, D.; Grafe, F.; Gruner, M.; Müller, B.; Popp, T.; Wilsnack, T.: MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl₂-Lösung ("MgO-SEAL"), Abschlussbericht, TUBAF, Freiberg, 29.02.2022

[2] Arendt, J.; Freyer, D.; Gruner, M.; Kudla, W.: MgO-S³

In situ testing of magnesia shotcrete for drift-sealing elements in rock salt formations, TUABF, 12th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, & Operation, Braunschweig (Germany), 6th – 9th September, 2022

[3] Daniela Freyer, D.; Gruner, M.; Popp, T.; Salzer, K.; Rölke, C.: MgO shotcrete for engineered barrier systems in salt formations - in situ tests with inflow of MgCl₂ bearing solution (R&D project MgO-SEAL) 10th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, & Operation, Rapid City, SD, USA, May 28-30, 2019

[4] Bauermeister, J.; Langefeld, O.; Schieweg, A.; Raebiger, L.; Viertel, T.; Flemming, J.; Noorhan, W.; Leyh, S.; Glaubach, U.; Wilsnack, T.; Müller-Hoeppe, N.; Hussein, A.; Fischer, T.; Lack, D.; Schicht, T. Brüning, M.; Kulenkampff, J.: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches, Schlussbericht (Hauptband), TUC, Clausthal-Zellerfeld, 12.06.2023



**BUNDESGESELLSCHAFT
FÜR ENDLAGERUNG**



TEC

BGE TECHNOLOGY GmbH

DR. NINA MÜLLER-HOEPPE
BGE TEC

BGE TECHNOLOGY GmbH | Eschenstr. 55 | 31224 Peine
T +49 5171 43-1529
E nina.mueller-hoeppe@bge.de

www.bge.de
www.einblicke.de



@die_BGE

www.bge-technology.de

TUBAF
Die Versuchsanstalt
Seit 1765

**TU BERGAKADEMIE
FREIBERG**

Ifg
Institut für
Gebirgsmechanik

**INSTITUT FÜR
GEBIRGSMECHANIK
GMBH**

Großtechnische Versuche: Wissensstand zu den Materialeigenschaften Zement- und MgO-basierter Verschlussbaustoffe

Matthias Gruner¹, Till Popp²

¹ TU Bergakademie Freiberg, Institut für Anorganische Chemie, Salz- & Mineralchemie, TU Bergakademie Freiberg
² Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig

Workshop „Zementbasierte Verschlussbauteile im Salinar“, 05.-07.09.2023, Braunschweig

586

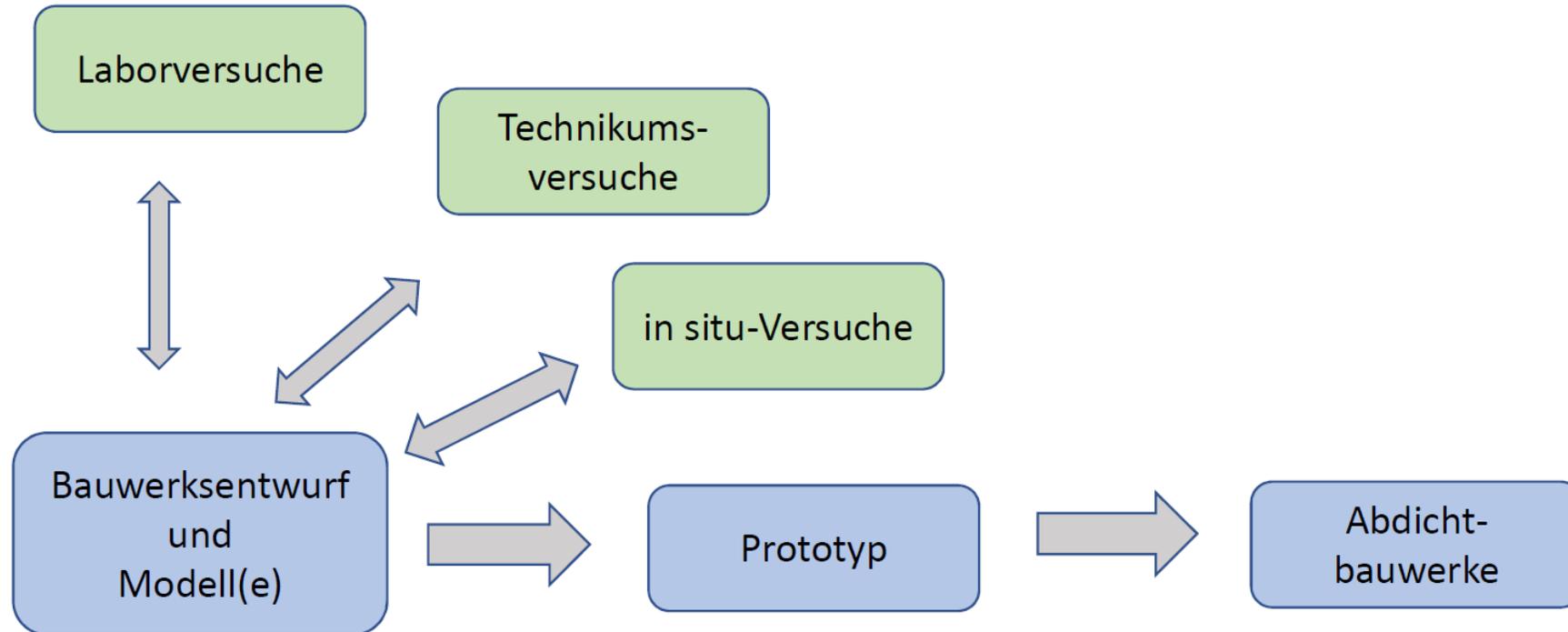
Inhalt

1. Großversuche als Teil des Nachweises der Funktionalität von Abdichtbauwerken
2. Verschlussmaterialien: Zementbasierte Baustoffe und MgO-Beton
3. MgO-Spritzbeton
4. MgO-Ortbeton C3
5. Schlussfolgerungen

Inhalt

1. **Großversuche als Teil des Nachweises der Funktionalität von Abdichtbauwerken**
2. Verschlussmaterialien: Zementbasierte Baustoffe und MgO-Beton
3. MgO-Spritzbeton
4. MgO-Ortbeton C3
5. Schlussfolgerungen

Vorgehensweise für den Nachweis der Funktionalität von Abdichtbauwerken



Kreienmeyer, 2018

Versuche: wie nahe an der Realität?

Realität:

Abmessungen:

L

A_{DE}

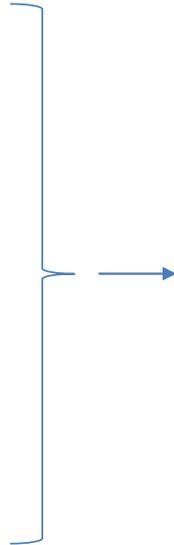
A_{ALZ}

R bzw. $R_{\text{äqu}}$

Belastung:

p_{FI}

$$\rightarrow I = \frac{p_{FI}}{\rho_{FI} \cdot g \cdot L}$$



Laborversuche:

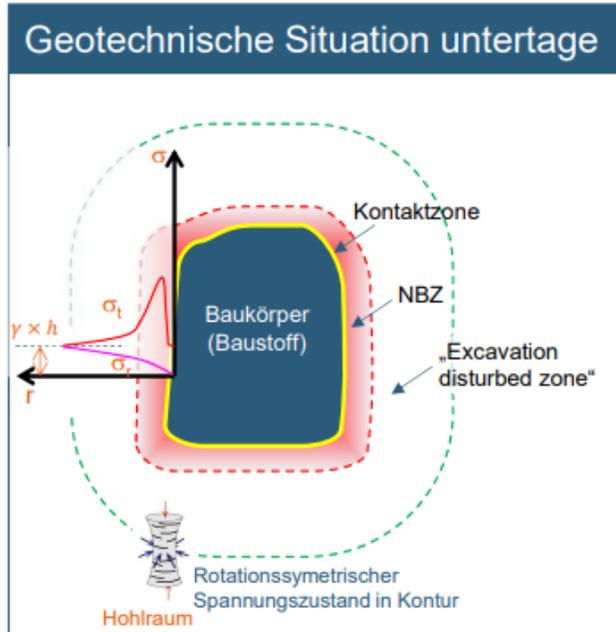
- Nur zur Bestimmung von Materialparametern ohne Maßstabeffekte (Festigkeit, Verformungsverhalten, thermische Parameter) geeignet
- Für komplexe Tests unter realitätsnahen Bedingungen nicht geeignet

Gleichzeitige Annäherung an realistische Flüssigkeitsdrücke und realistische Druckgradienten problematisch

Maßstabeffekte – Annäherung an die Realität

Stufe	Ziel	Maßstab
<u>Laborversuche:</u>	<ul style="list-style-type: none"> • Bestimmung von Materialparametern • Qualitätskontrolle 	$D_{\max} = 150 \text{ mm}$ $m < 1 \text{ kg}$
<u>Halbtechnische Versuche (HTV):</u>	<ul style="list-style-type: none"> • Eignungstest (Dichtheitsprüfung) • Realistische Belastungen • Erprobung Messtechnik 	$D_{\max} = 0,3 \text{ bis } 1 \text{ m}$ $m_{\max} = 1 \text{ t}$ $p_{\max} = 10 \text{ MPa}$
<u>In situ Pilotversuche:</u>	<ul style="list-style-type: none"> • Wie HTV, nur mit realistischem Umfeld (Gebirge) 	Meist Bohrlochversuche
<u>In situ Großversuche:</u>	<ul style="list-style-type: none"> • Test des Gesamtsystems • Bautechnische Machbarkeit • Umfangreiche Instrumentierung • Nachuntersuchungen 	Maßstab 1:3 bis 1:1

Untersuchungsziele von großtechnischen Versuchen



Baukörper (Baustoff)

Nachweis Eignung von MgO-Spritzbeton

- als Baustoff zum Bau von langzeitbeständigen Abdichtungen im Hauptanhydrit:
- ➔ **Herstellbarkeit / Handhabbarkeit**
- ➔ **Keine unzulässigen Bauzustände:**
 - Geringe Temperatur beim Abbinden
 - Geringe Verformungen / Spannungen
 - Druck – Expansionsdruck Baustoff
 - Vollständiges Abbinden – keine Restfeuchte
 -
- ➔ **Ausreichende Baustoff Eigenschaften:**
 - Hinreichende Festigkeit, u.a. Widerlagerfunktion gegen hydraul. Druck
 - Geringe Durchlässigkeit (Flächendichtung)
 - Anbindeverhalten an Anhydrit:
 - Dichtheit Kontaktzone
 - Scherfestigkeit / Haftzugfestigkeit Kontaktzone

Begleitende in situ Untersuchungen am realen Bauwerk

- Instrumentierung (Messkonzept)
- Begleitende Laboruntersuchungen (erreichte Materialparameter) und Technikumsversuche
- In situ Materialuntersuchungen (z.B. Bohrlochversuche)
- In situ Test ("Dichtheit")
- Nachuntersuchungen (z.B. selektiver Rückbau)

Bewertung des hydraulischen Verhaltens in Großversuchen

Voruntersuchungen:	<ul style="list-style-type: none"> • Gaspermeabilität und Lösungspemeabilität des Baustoffes (Labor) • Gaspermeabilität und Lösungspemeabilität des umliegenden Gebirges (ALZ → in situ)
1. Stufe:	<ul style="list-style-type: none"> • Effektive Gaspermeabilität des Gesamtsystems (Pfropfen und umliegendes Gebirge) = in situ Vortest
2. Stufe:	<ul style="list-style-type: none"> • Effektive Lösungspemeabilität des Gesamtsystems (Pfropfen und umliegendes Gebirge) = in situ Messungen bei ansteigenden konstanten Druckphasen über längere Zeiträume, bis maximal vorgesehenem Flüssigkeitsdruck
Option	<ul style="list-style-type: none"> • Versagenstest (Erhöhung der Belastung über den Bemessungswert) = <u>großer Lerneffekt</u>

Geotechnische Parameter und Messgeberauswahl

Baukörper (Baustoff)

- Geringe Temperatur beim Abbinden → Temperaturgeber (Bauphase / Langzeit)
- Geringe Verformungen / Spannungen → Dehnungsgeber
- Druck – Expansionsdruck Baustoff → Expansionsdruck (Druckkissen)
- Vollständiges Abbinden / Keine Restfeuchte → Messung der Feuchte

Kontaktzone / NBZ

- Injektionsdruck → Hydraulische Druckgeber
- Kontaktdruck auf Kontaktzone und NBZ → Druckkissen
- Potentieller Lösungsdruck in der Kontaktzone → Porendruckgeber
- Durchtritt von Lösung über NBZ/Kontaktzone → Messung der Feuchte

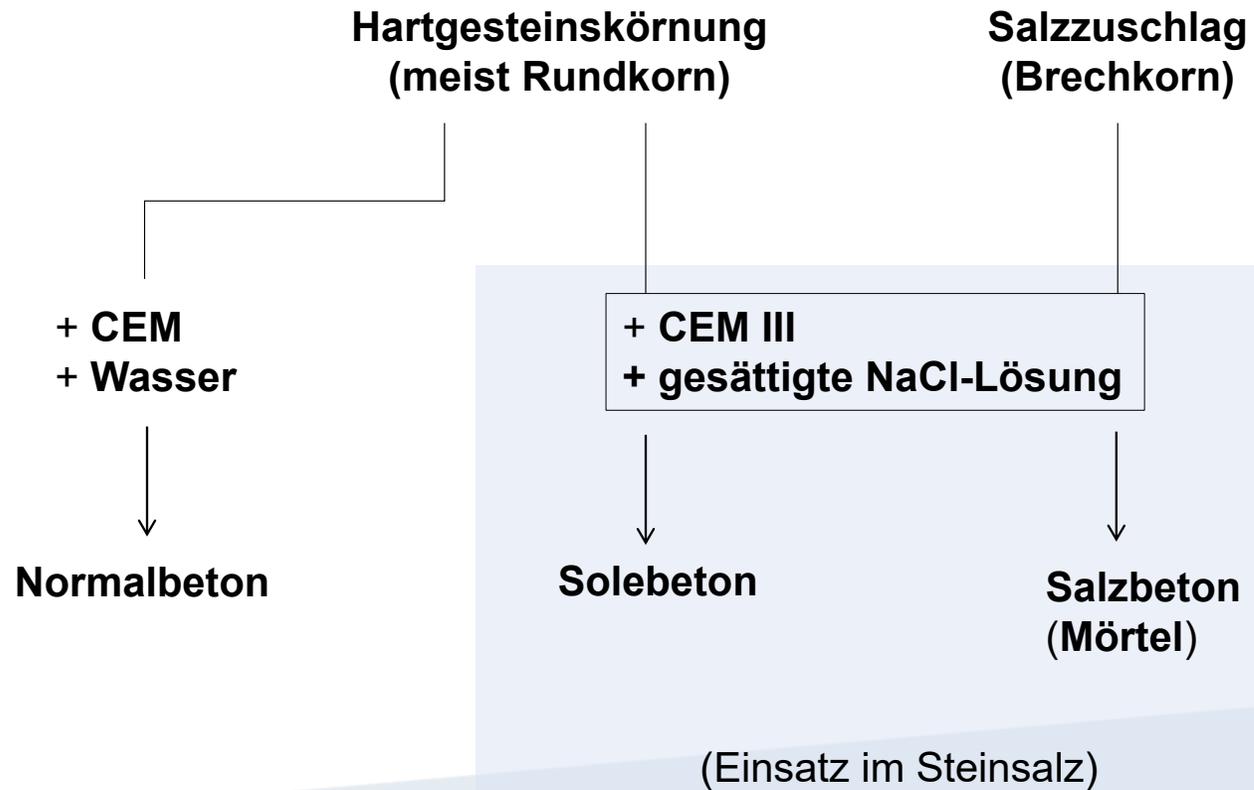
Inhalt

1. Großversuche als Teil des Nachweises der Funktionalität von Abdichtbauwerken
- 2. Verschlussmaterialien: Zementbasierte Baustoffe und MgO-Beton**
3. MgO-Spritzbeton
4. MgO-Ortbeton C3
5. Schlussfolgerungen

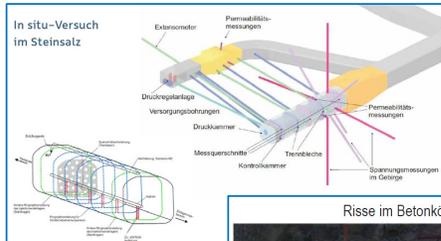
Baustoffe für Schacht- und Streckenverschlüsse

Massenbaustoffe: je nach Einsatzzweck Widerlager- / Dicht-Elemente				Dichtbaustoffe	Verfüllmaterialien
Zement-basiert (hydraulischer Binder)		MgO-basiert (Sorel-Binder)		Bentonit	Kies
Salzbeton	Solebeton	3-1-8 Rezepturen	5-1-8 Rezepturen		
<ul style="list-style-type: none"> Granularer Steinsalzzuschlag Wasser / -NaCl-Anmischlösung Zement-Binder sowie Additive 	<ul style="list-style-type: none"> Norm-Silikatzuschlag Wasser / -NaCl-Anmischlösung Zement-Binder 	Beispiele: A1 (Asse), C3 (TU-BAF), DBM2 (K-UTEC) <ul style="list-style-type: none"> Granularer Steinsalz- oder Silikatzuschlag MgO-Binder MgCl₂-Anmischlösung 	Beispiele: MB10 (CARLA) <ul style="list-style-type: none"> Silikatzuschlag /Salzgrus MgO-Binder MgCl₂-Anmischlösung 	<ul style="list-style-type: none"> Granulat Formsteine Binäres Gemisch <ul style="list-style-type: none"> Widerlager erforderl. Stabil im Salinar (Analogon Salztone) 	<ul style="list-style-type: none"> Reine Verfüllsäule GGfs. nicht setzungsstabil /Nachverfüllung Gestufte Kornfraktion entsprechend Grundwasserhorizont
Ortbeton	Ortbeton	Ort-Beton	Ort- / Spritzbeton	Asphalt ($\rho_A > \rho_{fl}$)	Salzgrus / GESAV
Im NaCl-Milieu - beständig		Im Kontakt mit MgCl ₂ Lsg. chemisch Langzeitstabil	Im Kontakt mit MgCl ₂ Umwandlung in 3-1-8 Phase (indirekt stabil)	<ul style="list-style-type: none"> Asphalt-Mastix Faser-Asphalt Asphalt-Matten <ul style="list-style-type: none"> Widerlager erforderl. Inert im Salinar 	<ul style="list-style-type: none"> Arteigen Langzeitdichtung nach Kompaktion durch Konvergenz Widerlager erforderl.
Mit MgCl ₂ – Lsg.: unbeständig (Korrosion)		Autogener Expansionsdruck	Selbstabdichtung bei Lösungszutritt	Bitumen ($\rho_B < \rho_{fl}$)	Schotter
				<ul style="list-style-type: none"> Heißbitumen Injektion Bitumen Injektion Bit.-Emulsion <ul style="list-style-type: none"> Inert im Salinar Widerlager erforderl. Problem Zulassung 	<ul style="list-style-type: none"> Verfüllsäule Setzungsstabil / Lastabtrag (Widerlager) Sicherung Füllortbereiche
<ul style="list-style-type: none"> Schwinden / keine chem. Langzeitstabilität 		Wasserlöslichkeit / Löslichkeit bei NaCl-Lsg.		Schottersäule mit Bitumen ($\rho_B < \rho_{fl}$)	
<ul style="list-style-type: none"> viele bergbauliche Erfahrungen für Schächte Solebeton – Normzuschläge Klassierter Salzgrus einfach verfügbar 		<ul style="list-style-type: none"> Mindestens Volumen-konstant Eigenschaften über Rezeptur einstellbar / z.B. für 3-1-8-Rezeptur temporärer Expansionsdruck 		<ul style="list-style-type: none"> Lastabtragende Funktion Diversitäres Dichtelement Geringe Erfahrungen / Einbringproblematik 	

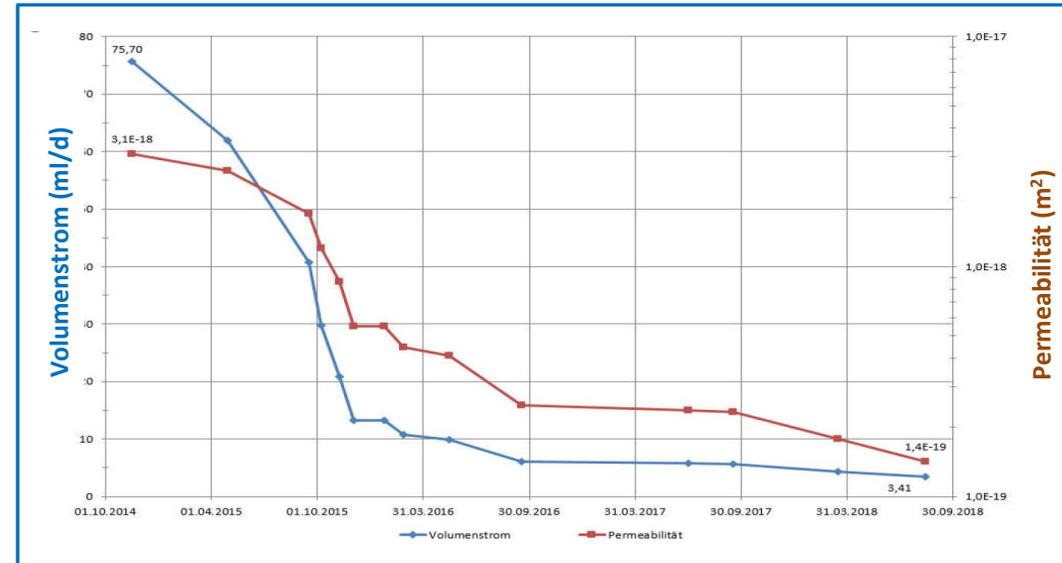
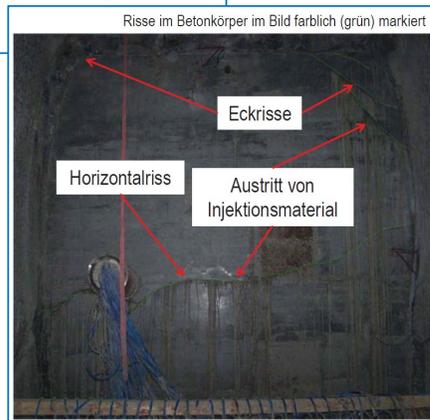
Einteilung Zementbasierter Baustoffe



Funktionsprüfung in situ – Beispiel: ERAM - Abdichtbauwerk im Steinsalz



In situ-Versuch für Abdichtung im Steinsalz als Salzbeton-Damm einschließlich nachfolgender Injektion zur Abdichtung der Kontaktfläche



Vorgaben / Anforderungen

[BfS, R. Mauke]

Eingehalten für

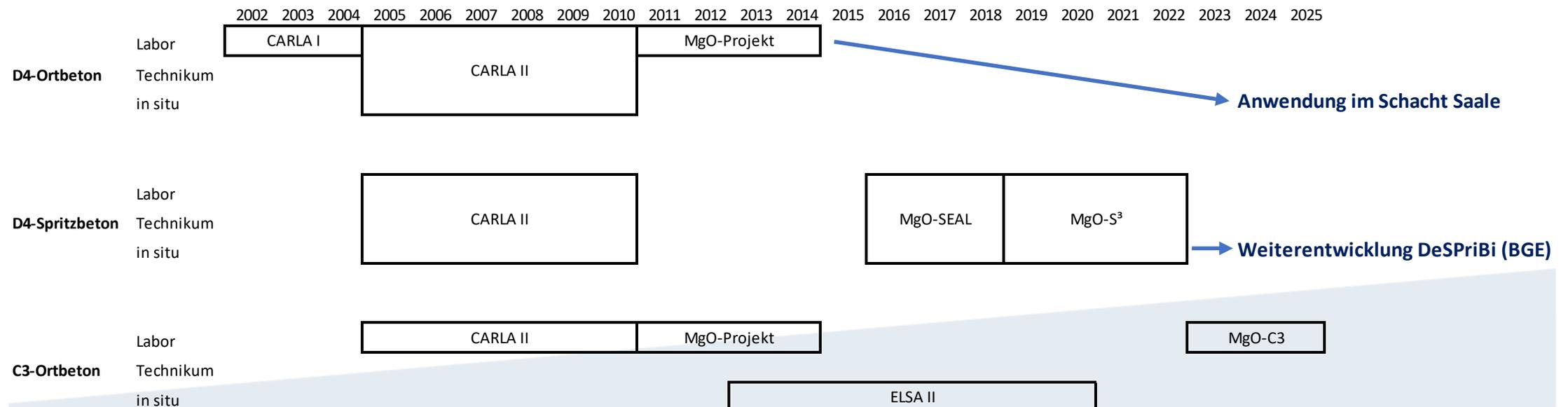
- ✓ Nachschnitt und Reprofilierung der Strecke
- ✓ „Frisch in frisch“ Betonage, Einbringtemperatur
- ✓ < 30°C (klimatisch günstige Randbedingungen)
- ✓ Salzbetonkennwerte (Temperatur, Schwinden, Festigkeiten, Steifigkeiten, etc.)
- ✓ Anbindung Baukörper an Salzgebirge:
- ✓ Probekörper mit ausreichender Festigkeit

Nicht eingehalten für

- ⊗ Rissbeschränkung (sichtbarer Horizontalriss, Eckrisse, Querrisse in Bohrungen)
- ⊗ Injektion des Konturspalts nur teilweise erfolgreich (u.a. Injektionsleitungen teilweise dicht, Materialaustritt an Rissen)
- ⊗ Ausfräsen Hüllrohr (nur unvollständig, mangelhafter Verbund zum Gebirge)

Übersicht zu bisherigen FuE-Aktivitäten zu den MgO-Baustoffen mit Hartgesteinszuschlag

Rezepturtyp	„3-1-8“	„5-1-8“		
Zuordnung bekannter Rezepturen	A1 DBM2 C3			D4 (MB10)
Bindemittelphasen- ausbildung nach Abbinden	+ 3-1-8 Porenisig	3 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O (= Mg ₂ (OH) ₃ Cl · 4 H ₂ O)	3 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O + 5 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O	5 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O (= Mg ₃ (OH) ₅ Cl · 4 H ₂ O) + MgO
Molarer Ansatz MgO : MgCl ₂ : H ₂ O	< 3...	3 : 1 : 11	(3 - 5) : 1 : (11 - 13)	5 : 1 : 13 (>5) : 1 : 13



Wdh.: Grundrezepturen des MgO-Baustoffs

	GV2 (Spritzbeton)	Ortbeton D4	Ortbeton C3
MgO	15,6 %	16 %	6,8 %
Lösung	R-Lösung 11,5 %	5 molale MgCl ₂ -Lösung 16 %	5 molale MgCl ₂ -Lösung 15,8 %
Hartgesteins- körnung 0 – 8 mm	72,9 %	68 %	55,9 % + 21,5 % Quarzmehl M300 (d ₅₀ = 17 µm)
Resultierend Bindemittelphase	5-1-8 Phase (+ Rest-MgO) = 5 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O		3-1-8 Phase = 3 Mg(OH) ₂ · MgCl ₂ · 8 H ₂ O

MgO-S³
(bis 31.3.2022)

Schacht Saale

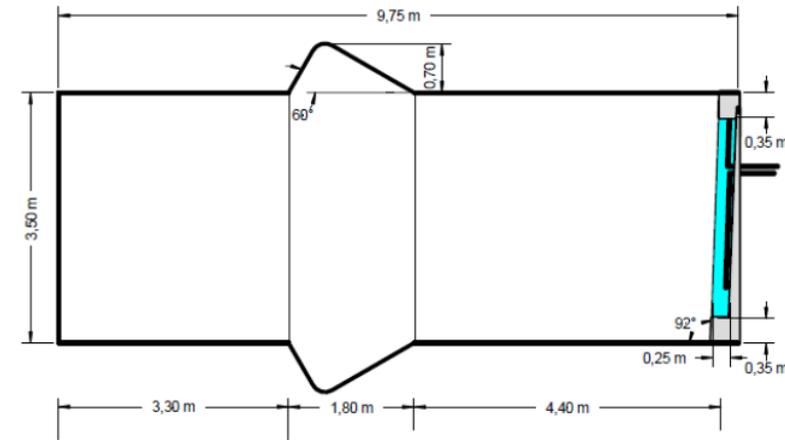
Fortsetzung FuE

Inhalt

1. Großversuche als Teil des Nachweises der Funktionalität von Abdichtbauwerken
2. Verschlussmaterialien: Zementbasierte Baustoffe und MgO-Beton
- 3. MgO-Spritzbeton**
4. MgO-Ortbeton C3
5. Schlussfolgerungen

Beispiel Bauwerk GV2

**Großversuch GV2:
MgO-Spritzbeton
Bauzeit: 18.2. – 30.9.2008**



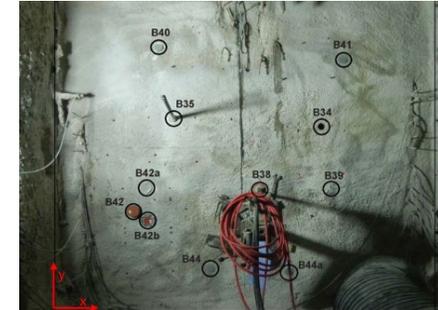
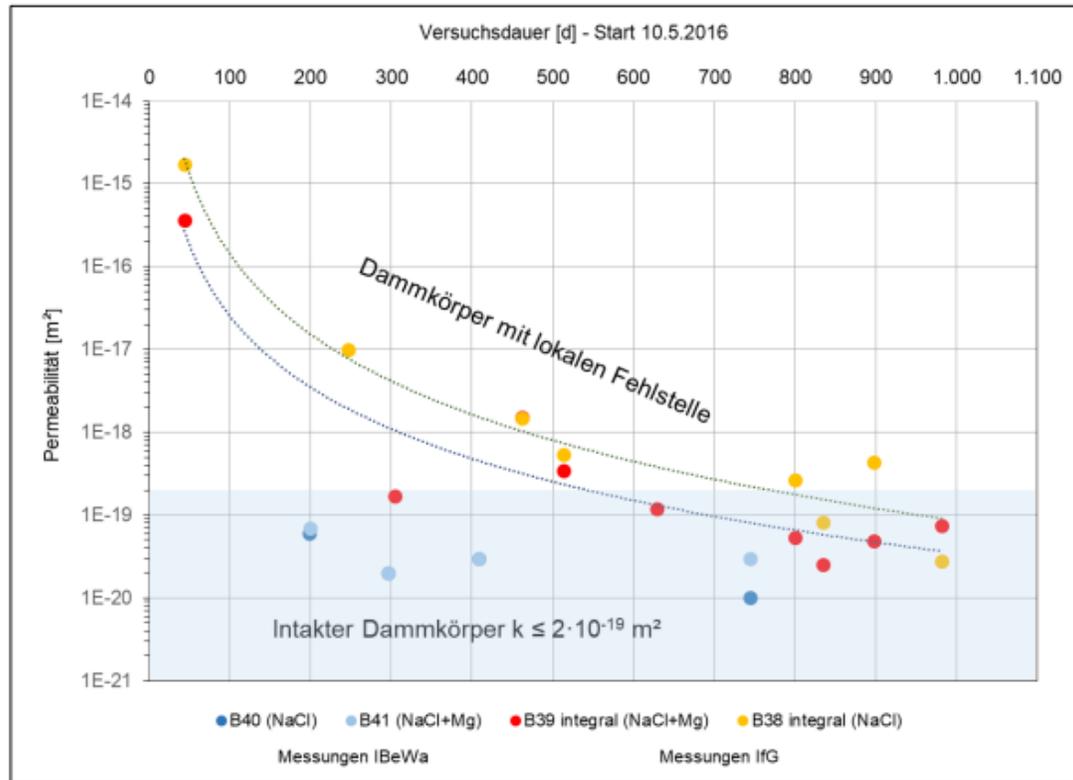
Selektiver Rückbau der Mantelfläche GV2



- Detektion von Lösungszutritt im umliegenden Gebirge
- Begutachtung der Kontaktfläche (Verteilung Injektionsmittel)
- Radiale Bohrungen MgO-Spritzbeton (Kernmaterial für Untersuchungen, Kamerabefahrung, in situ Permeabilität)
- Ultraschalluntersuchungen der BAM

Nachweis der aktiven Selbstabdichtung des MgO-Spritzbetons (D4)

In situ Bohrlochmessungen mit Lösung
(axiale Bohrlöcher, mehrere BAG, praktisch \perp angeschnitten)



Auch hochpermeable Fehlstellen werden mit der Zeit durch Reaktion der vorliegenden 5-1-8-Bindemittelphase mit der Zutrittslösung unter Bildung der 3-1-8-Phase (unter Volumenzunahme) abgedichtet – auch im Falle einer reinen NaCl-Lösung

[Abschlussbericht MgO-SEAL]

18

Matthias Gruner, Till Popp
Großtechnische Versuche – Wissensstand zu den Materialeigenschaften Zement- und MgO-basierter Verschlussbaustoffe



Nachweis der aktiven Selbstabdichtung des MgO-Spritzbetons (D4)

In situ Bohrlochmessungen mit Gas und Lösung
(radiale Bohrlöcher, einzelne BAG leicht schräg angeschnitten)

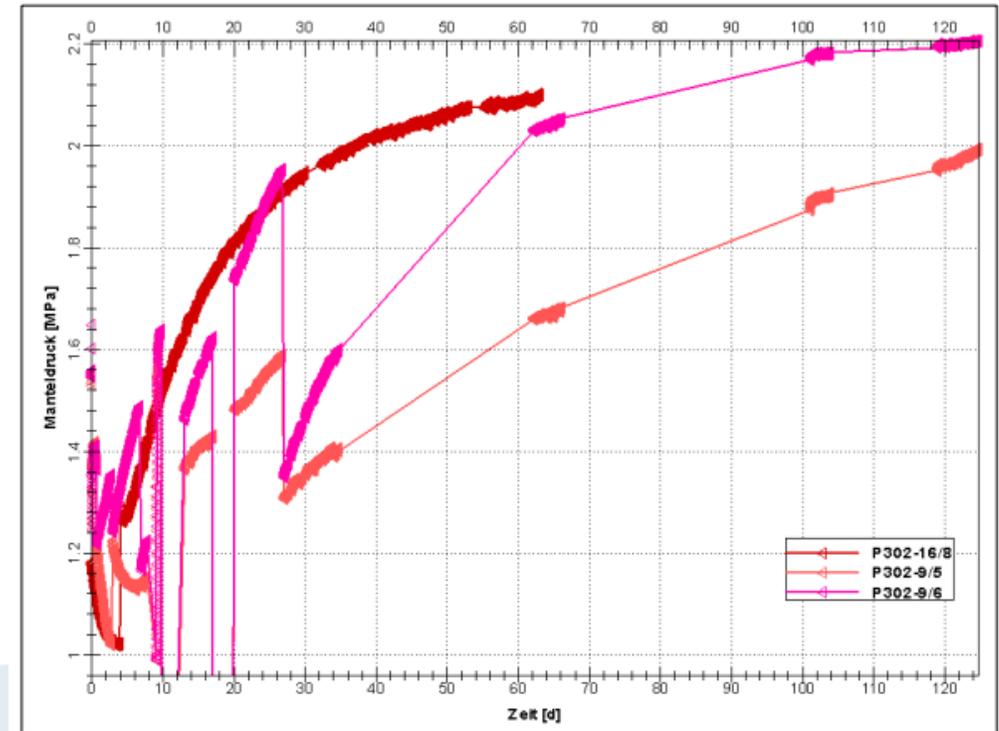
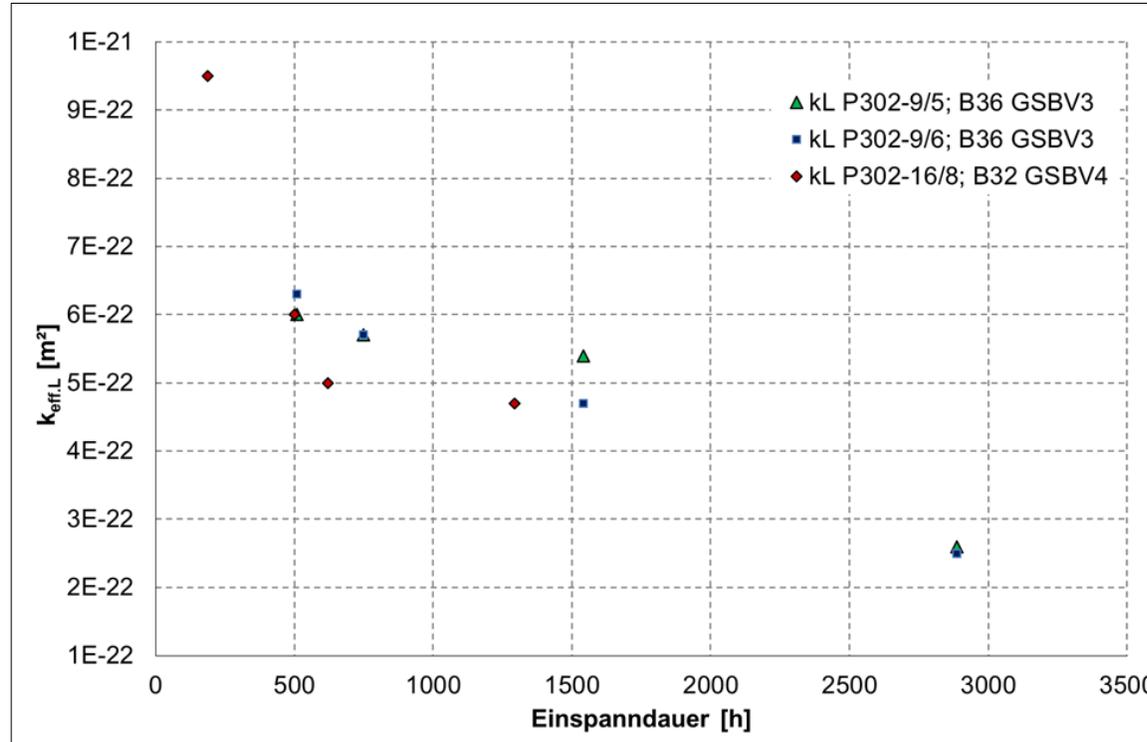
Bohrung	Messpunkt- bezeichnung	Prüfdruck	Prüfmedium	Teufe OK	Teufe UK	Teufe MP	Permeabilität	Bemerkung
B45	B45_043_INT_G1	0,8	Gas	0,43	2,36	1,40	$1,7 \cdot 10^{-17}$	
	B45_043_INT_L1	0,4	Salz- lösung	0,43	2,36	1,40	$< 1 \cdot 10^{-21}$	
	B45_040_G1	0,8	Gas	0,40	0,60	0,50	$1,2 \cdot 10^{-19}$	
	B45_060_G1	0,8		0,60	0,80	0,70	$2,2 \cdot 10^{-19}$	
	B45_080_G1	0,8		0,80	1,00	0,90	$4,8 \cdot 10^{-18}$	
	B45_100_G1	0,8		1,00	1,20	1,10	$2,1 \cdot 10^{-16}$	BAG
	B45_120_G1	0,8		1,20	1,40	1,30	$2,0 \cdot 10^{-16}$	Bruch- kante
	B45_140_INT_G1	0,8		1,40	2,36	1,88	$2,2 \cdot 10^{-19}$	integral Bohrung
B46	B46_043_INT_G1	0,8		Gas	0,43	3,20	1,82	$5,0 \cdot 10^{-20}$

- Permeabilitätsverringerng (Selbstabdichtung) in der Bohrung B45 bei Lösungseinwirkung
- Bohrung 46 ist bereits "dicht" → kein Lösungstest

[Messungen IBeWa: Abschlussbericht MgO-S³]

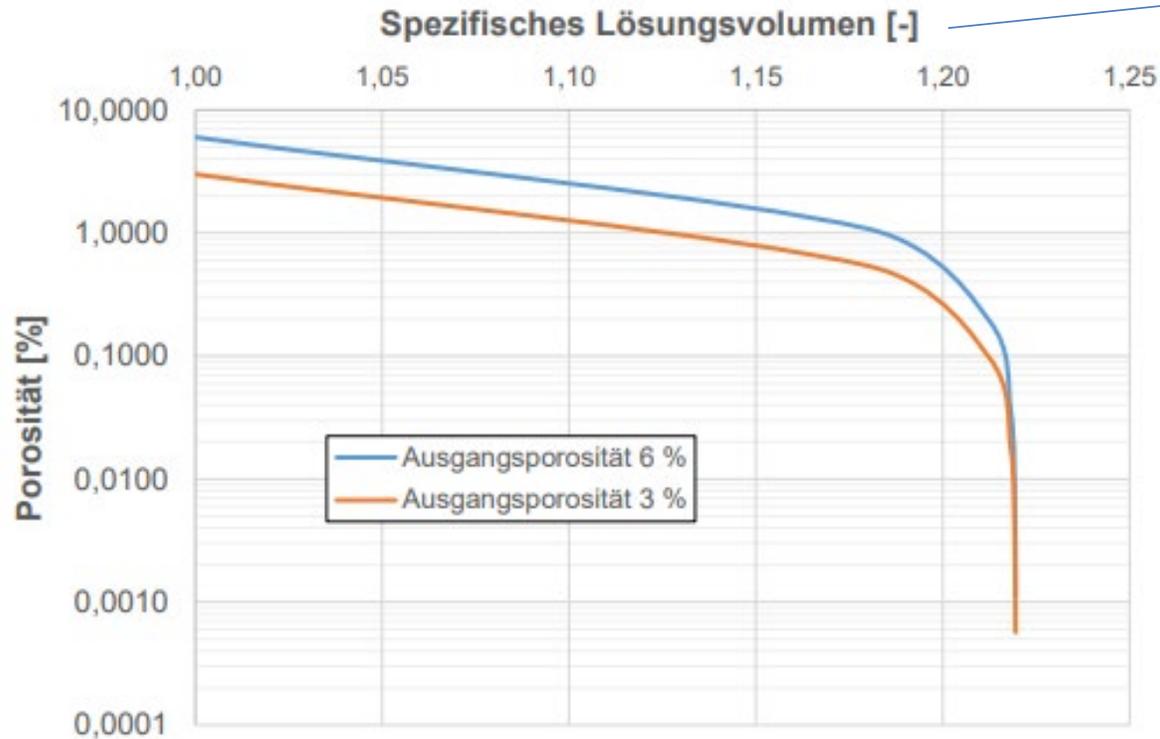
Nachweis der aktiven Selbstabdichtung des MgO-Spritzbetons (D4)

Schnelle Abnahme der Lösungspermeabilität an Kernen aus in situ Spritzversuchen
 - auch messbar durch Zunahme des Manteldruckes



[Messungen IBeWa: Abschlussbericht MgO-S³]

Abhängigkeit der Porosität im MgO-Beton der Rezeptur D4 in Abhängigkeit von der Menge an eingedrungener Lösung



$$V_{L, \text{spez.}} = \frac{\sum V_{L,i}}{V_{P,0}}$$

kumulatives Lösungsvolumen über alle Einzelstufen "i"

Porenvolumen im Ausgangszustand

$$V_{p,0} = n_0 \cdot V$$

Porosität des MgO-Betons im Ausgangszustand

Volumen des MgO-Betons

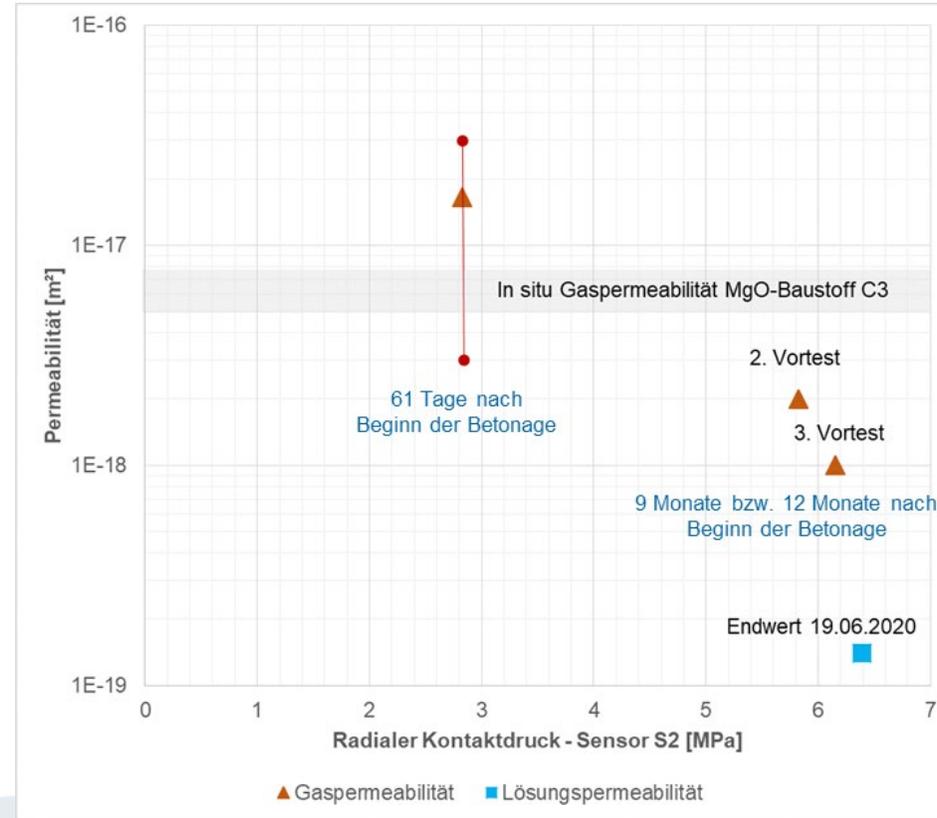
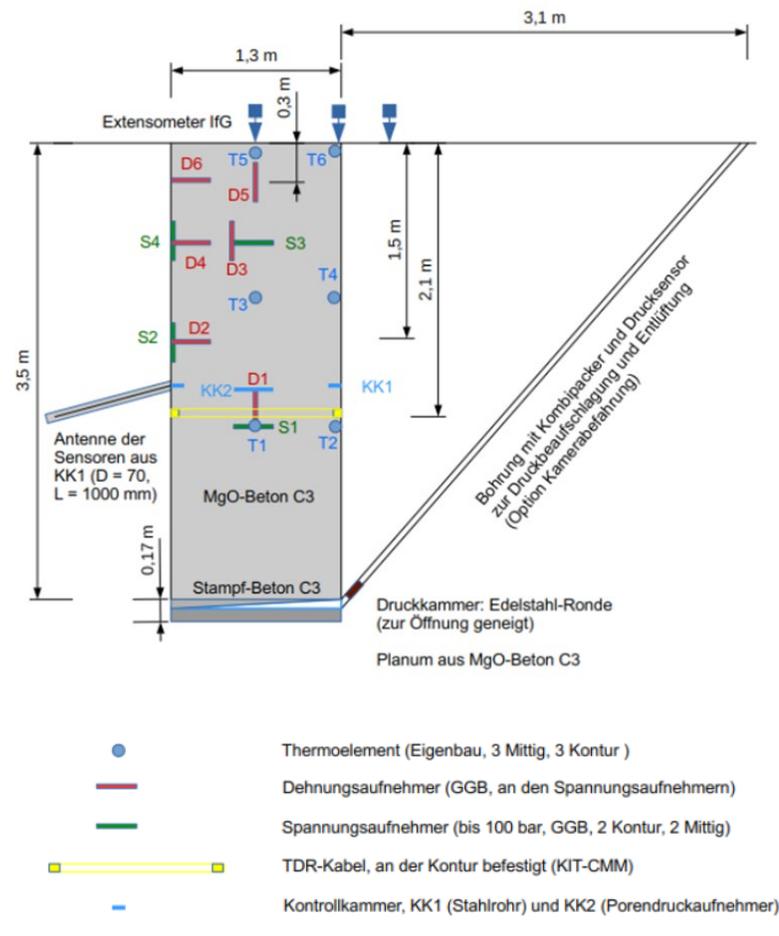
Volumenzunahme des Reaktionsproduktes führt zu einer Verringerung der Porosität = Verringerung der Permeabilität

Ausgangsporosität ist nur zu Beginn relevant

Inhalt

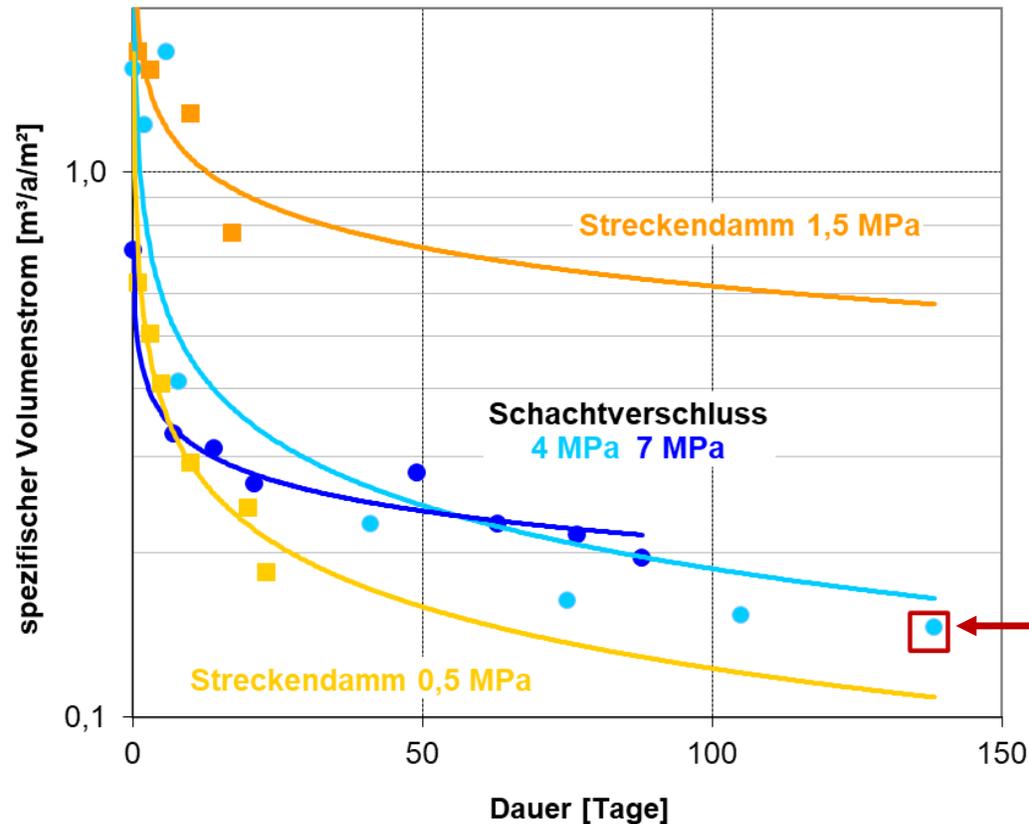
1. Großversuche als Teil des Nachweises der Funktionalität von Abdichtbauwerken
2. Verschlussmaterialien: Zementbasierte Baustoffe und MgO-Beton
3. MgO-Spritzbeton
- 4. MgO-Ortbeton C3**
5. Schlussfolgerungen

MgO-Ortbeton C3: Bewertung des hydraulischen Verhaltens in situ (Beispiel GBLV2)



Untersuchungen werden bis Ende 2025 fortgesetzt

Vergleichbarkeit unterschiedlicher Versuche durch einen spezifischen (eingehenden) Volumenstrom (normiert zur Querschnittfläche)

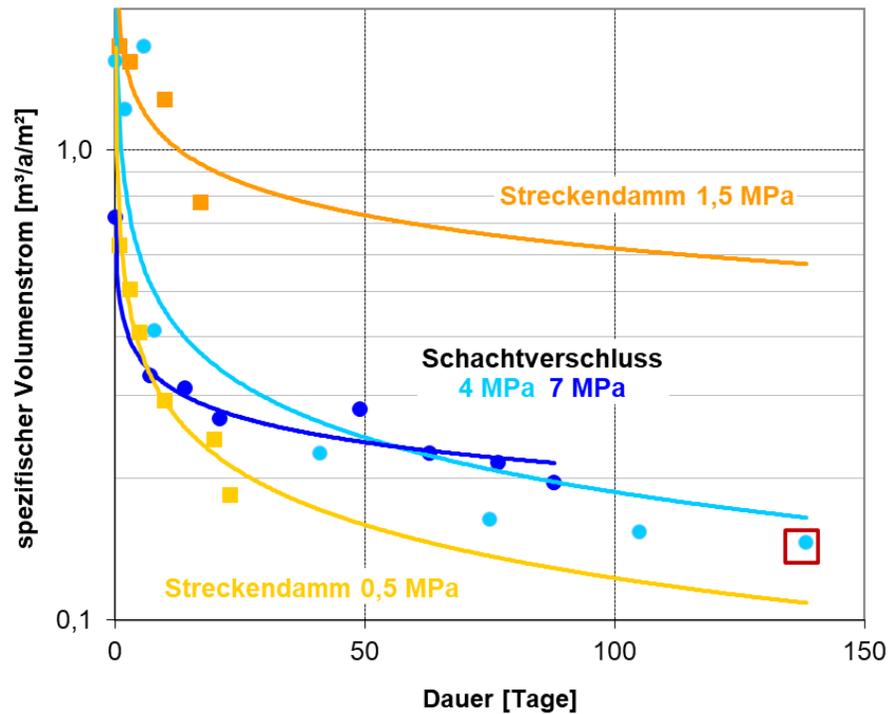


"Streckendamm"
= in situ Versuch Sondershausen
(Bentonitformsteine im Steinsalz)

"Schachtverschluss"
= in situ Versuch Salzdettfurth
(Binäres Bentonitgemisch im
Steinsalz)

**Endwert im in situ GBLV2 =
MgO-Ortbeton C3 im Steinsalz**

Vergleichbarkeit unterschiedlicher Versuche durch einen spezifischen (eingehenden) Volumenstrom (normiert zur Querschnittfläche)



- Unter günstigen Bedingungen (Steinsalz, vertikales Element) sind $< 0,2 \text{ m}^3/(\text{a}\cdot\text{m}^2)$ realistisch erreichbar.
- Mit zunehmender Zeit $\rightarrow < 0,1 \text{ m}^3/(\text{a}\cdot\text{m}^2)$
- Zum Vergleich Verdunstungsrate: $0,7 \text{ bis } 0,9 \text{ m}^3/(\text{m}^2\cdot\text{a})$
- Für einen Schacht bei $0,1 \text{ m}^3/(\text{a}\cdot\text{m}^2)$:
 - $D = 6 \text{ m} \rightarrow Q < 2,8 \text{ m}^3/\text{a}$
 - $D = 8 \text{ m} \rightarrow Q < 5,0 \text{ m}^3/\text{a}$
- Austretender Volumenstrom ???

Was ist "Dichtheit"?

"Dichtheit" = Spezifizierung des hydraulischen Widerstandes im Dichtelement sowie in der Kontakt- und Auflockerungszone [ELSA – Phase 1]

Dichtheitskriterien

Permeabilität des Gesamtsystems:

- $k \leq 10^{-18} \text{ m}^2$
- $k_{\text{DM}} \approx k_{\text{intaktes Gebirge}} \approx (10^{-19} \dots 10^{-21}) \text{ m}^2$

→ Nicht ausreichend ?

Durchströmungszeit durch das Dichtelement:

- z.B. $> 10.000 \text{ a}$

→

$$t = \frac{n(1-S_0)\eta_{Fl}}{k p_{Fl}} \frac{L^2}{2} = \frac{n(1-S_0)}{k_f H} \frac{L^2}{2}$$

n Porosität (DE, ALZ)
 S_0 Anfangssättigung = $f(n, w_0)$ (DE, ALZ)
 η_{Fl} dyn. Viskosität des Fluids

Beachten: $k = f(n)$

Zulässiger Flüssigkeitsvolumenstrom:

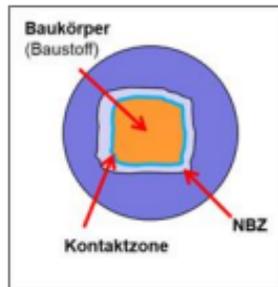
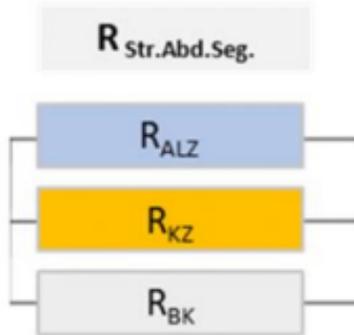
- z.B. $< 1 \text{ m}^3/\text{a} \dots < 2 \text{ m}^3/\text{a} \dots < 5 \text{ m}^3/\text{a}$

→

Praxisnah

Einfluss des umliegenden Gebirges (ALZ)

Hydraulischer Widerstand eines Abdichtungsbauwerks
(Quelle: BGE)



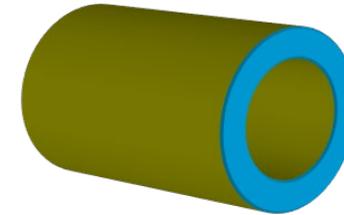
- Hydraulischer Widerstand eines Streckenabdichtungssegmentes („R_{Str.Abd.Seg.}“):
- Zur Abschätzung des hydraulischen Widerstandes eines Streckenabdichtungssegmentes, werden die hydraulischen Einzelwiderstände für den jeweiligen Baukörper, die Kontaktzone und Auflockerungszone berücksichtigt
- Der hydraulische Widerstand des Streckenabdichtungssegmentes wird, durch die parallel zu einander geschalteten hydraulischen Einzelwiderstände berechnet

Die Einzelwiderstände werden als „R_{Str.Abd.Seg.}“ zusammengefasst:

$$\frac{1}{R_{\text{Str.Abd.Seg.}}} = \frac{1}{R_{\text{BK}}} + \frac{1}{R_{\text{KZ}}} + \frac{1}{R_{\text{ALZ}}} \quad [\text{m}^3]$$

$$R_{\text{Str.Abd.Seg.}} = \frac{R_{\text{BK}} \cdot R_{\text{KZ}} \cdot R_{\text{ALZ}}}{R_{\text{KZ}} \cdot R_{\text{ALZ}} + R_{\text{BK}} \cdot R_{\text{ALZ}} + R_{\text{BK}} \cdot R_{\text{KZ}}} \quad [\text{m}^3]$$

Permeabilität von parallel verlaufenden Zonen (Dichtelement + ALZ)

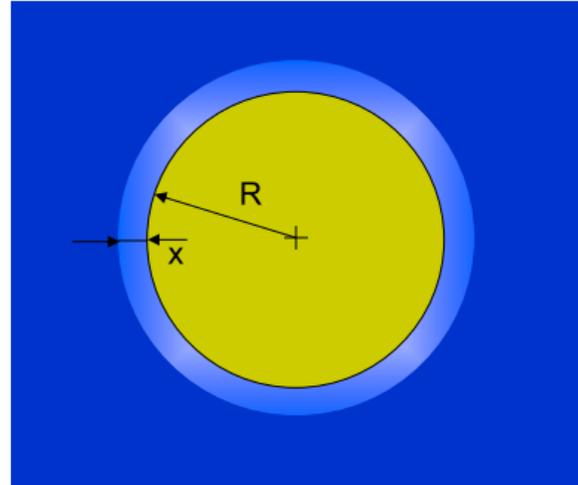


$$k_{\text{eff}} = \frac{k_{\text{DE}} \cdot A_{\text{DE}} + k_{\text{ALZ}} \cdot A_{\text{ALZ}}}{A_{\text{DE}} + A_{\text{ALZ}}}$$

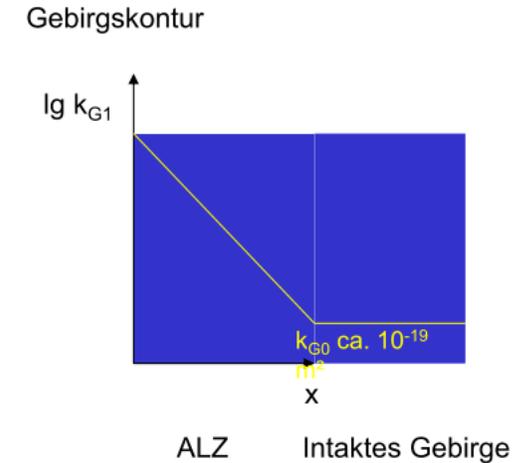
→ Die durchlässigste Zone (höchste Permeabilität bestimmt das Gesamtsystem

Volumenstrom als praxisnahes Dichtheitskriterium

$$Q_{\Sigma} = k_{f,DE} \cdot \frac{H}{L} \cdot A_{DE} + k_{f,G} \cdot \frac{H}{L} \cdot A_G$$



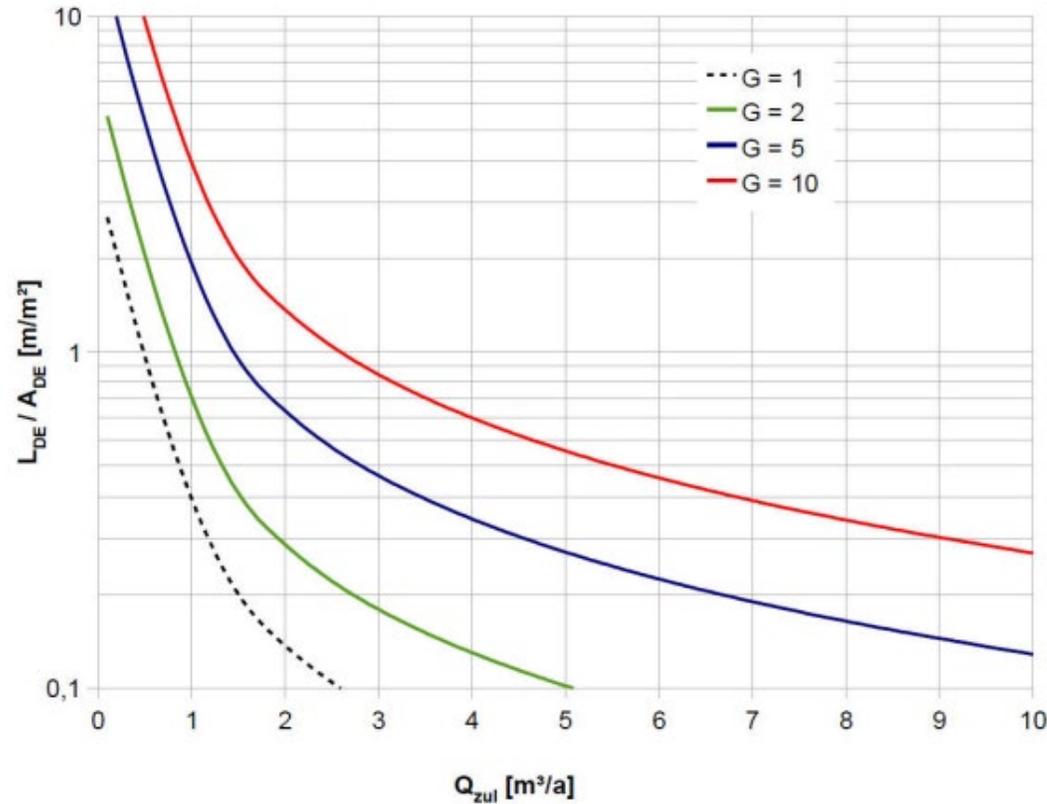
- R Radius des Dichtelementes [m]
- x Mächtigkeit der ALZ [m]
- Q_{Σ} Gesamtvolumenstrom [m³/s]
- H Hydraulische Höhe [m]
- A_{DE} Querschnitt des Dichtelementes [m²]
- A_G Querschnitt der ALZ [m²]
- L Länge des durchströmten Bereiches [m]
- $k_{f,G}$ hydraulische Leitfähigkeit der ALZ [m/s]
- $k_{f,DE}$ hydraulische Leitfähigkeit des Dichtelementes [m/s]



Berücksichtigung der Kontaktzone? k_z ?, A_K ?

Spaltströmung?

Notwendige Länge eines Dichtelementes



$$L_{DE} = \frac{G}{Q_{zul}} \cdot k_{f,DE} \cdot H \cdot A_{DE}$$

L_{DE} Mindestlänge des Dichtelementes [m],
 $k_{f,DE}$ hydraulische Leitfähigkeit des Dichtelementes [m/s],
 H Hydraulische Druckhöhe [m],
 A_{DE} Querschnitt des Dichtelementes [m²],
 G dimensionsloser Gebirgsparameter [-]

Berücksichtigung der Umströmung:

$$G = 1 + \frac{k_{f,G}}{k_{f,DE}} \left[\left(\frac{X}{R} \right)^2 + 2 \frac{X}{R} \right] = \frac{Q_{\Sigma}}{Q_{DE}} = 1 + \frac{Q_G}{Q_{DE}}$$

R Radius des Dichtelementes [m],
 X Mächtigkeit der ALZ [m],
 Q_{DE} Volumenstrom durch das Dichtelement [m³/s],
 Q_G Volumenstrom durch das Gebirge (über die ALZ) [m³/s]

- Je nach Umströmung sind zulässige Volumenströme < 2 m³/a nicht immer erreichbar
- Große Längen der Dichtelemente erforderlich

Inhalt

1. Großversuche als Teil des Nachweises der Funktionalität von Abdichtbauwerken
2. Verschlussmaterialien: Zementbasierte Baustoffe und MgO-Beton
3. MgO-Spritzbeton
4. MgO-Ortbeton C3
- 5. Schlussfolgerungen**

Allgemeine Schlussfolgerungen

- **Mit den vorhandenen MgO-Baustoffrezepturen ist es möglich, langzeitsichere und hinreichend dichte Abdichtungen für Schächte oder Strecken im Wirtsgestein Salz zu bauen.**
- **Die integrale Dichtheit des Bauwerks hängt vor allem von einer möglichen Umströmung über die ALZ bzw. die Kontaktzone ab, während der Baustoff insgesamt sehr niedrig permeabel ist.**
- **Beim MgO-Spritzbetonbauwerk (5-1-8-Rezeptur) führt ein Zutritt von NaCl-gesättigter, $MgCl_2$ -haltiger Lösung zur "Selbstabdichtung".**
- **Die initiale Dichtheit verbessert sich im kriechfähigen Salzgebirge mit zunehmender Einspannung: Abnahme der Permeabilität, (1) über die Verringerung der Wirksamkeit der ALZ und (2) die Einspannung des Baustoffs.**
- **Die Wirksamkeit eines Bauwerks lässt sich realitätsnah über den spezifischen Grenzvolumenstrom beschreiben.**
- **Diversitäre Ausführungen durch Kombination von MgO-Beton mit Asphalt/Bitumen.**

Vorteile der MgO-Baustoffe C3 und D4

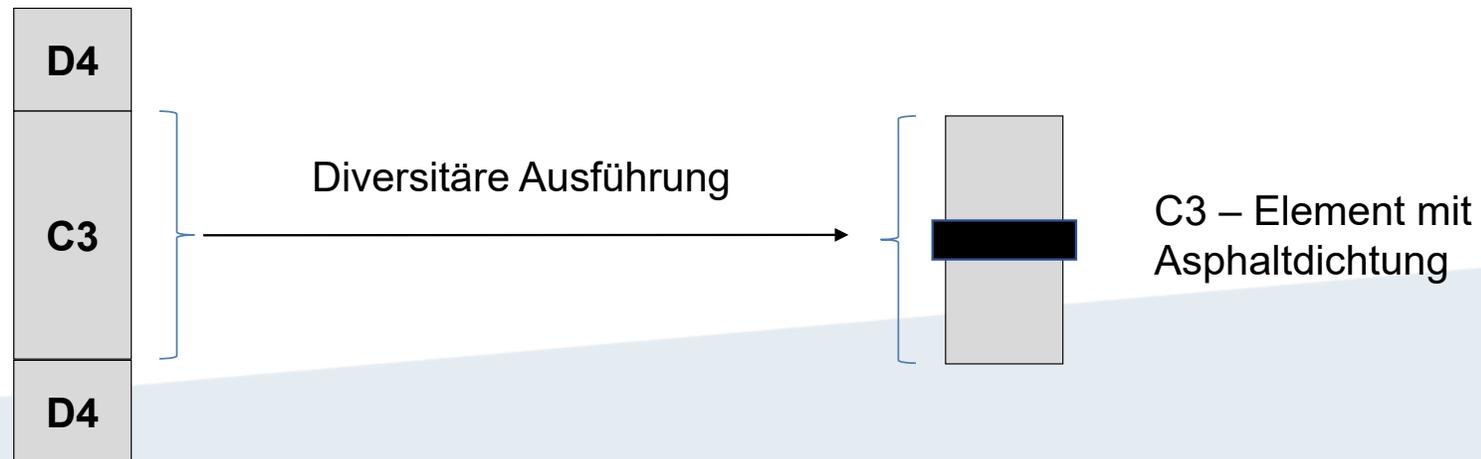
C3: schnell wirksame Abdichtung des Kontaktbereiches
(keine Kontaktbereichsinjektion erforderlich)

D4: Aktive Selbstabdichtung bei Lösungszutritt



Beide Baustoffe kombinieren !

Beispiel für Schachtverschlüsse:



THC-Modellierung von zementbasierten Abdichtmaterialien und Verschlussbauwerken

Frank Schmidt-Döhl
Technische Universität Hamburg

schmidt-doehl@tuhh.de

Gliederung

- Einleitung
- THC(M)-Modellierung
- Thermische Prozesse
- Stofftransportprozesse
- Reaktionsprozesse
- Rückwirkung auf Porenstruktur und Transporte
- Korrosive Effekte
- Probabilistik
- Forschungsbedarf
- Experimentelle Tests
- Fazit

Wann muss man eigentlich simulieren?

Wenn:

- Prozesse sehr langsam sind, z.B. Transporte in Salzbeton
- Prozesse sehr schnell sind, z.B. Explosionen
- Prüfkörper sehr groß sind
- Prozesse sehr komplex sind
- Ergebnisse im Laborexperiment nicht gemessen, aber in der Simulation berechnet werden können oder
- Computersimulationen Kosten einsparen können

Verlegung eines Laborexperimentes in den Rechner

Was machen wir beim Simulieren?

Alle relevanten Teilprozesse eines Vorganges in Form von gekoppelten Gleichungen beschreiben und das sich ergebende Gleichungssystem numerisch lösen

Ausnahme: Expertensysteme

Hilft uns zukünftig KI?

Problematisch: Chaotische Systeme, z.B. Wettervorhersage

Was bedeutet THC(M)-Modellierung?

- T Simulation thermischer Prozesse
- H Simulation von Stofftransportprozessen
- C Simulation chemischer Prozesse
- M Simulation mechanischer Prozesse

Korrosionsprozesse: zumindest THC Modellierung

Gibt es überhaupt eine vollständige THCM-Modellierung?

Wovon hängt die Güte einer Simulation ab?

- In wie weit die zugrundeliegenden physikalisch-chemischen Modelle die Realität abbilden können
- Von der Qualität der Algorithmen
- Der Qualität der Eingangsgrößen
- Von der Kompetenz des Anwenders

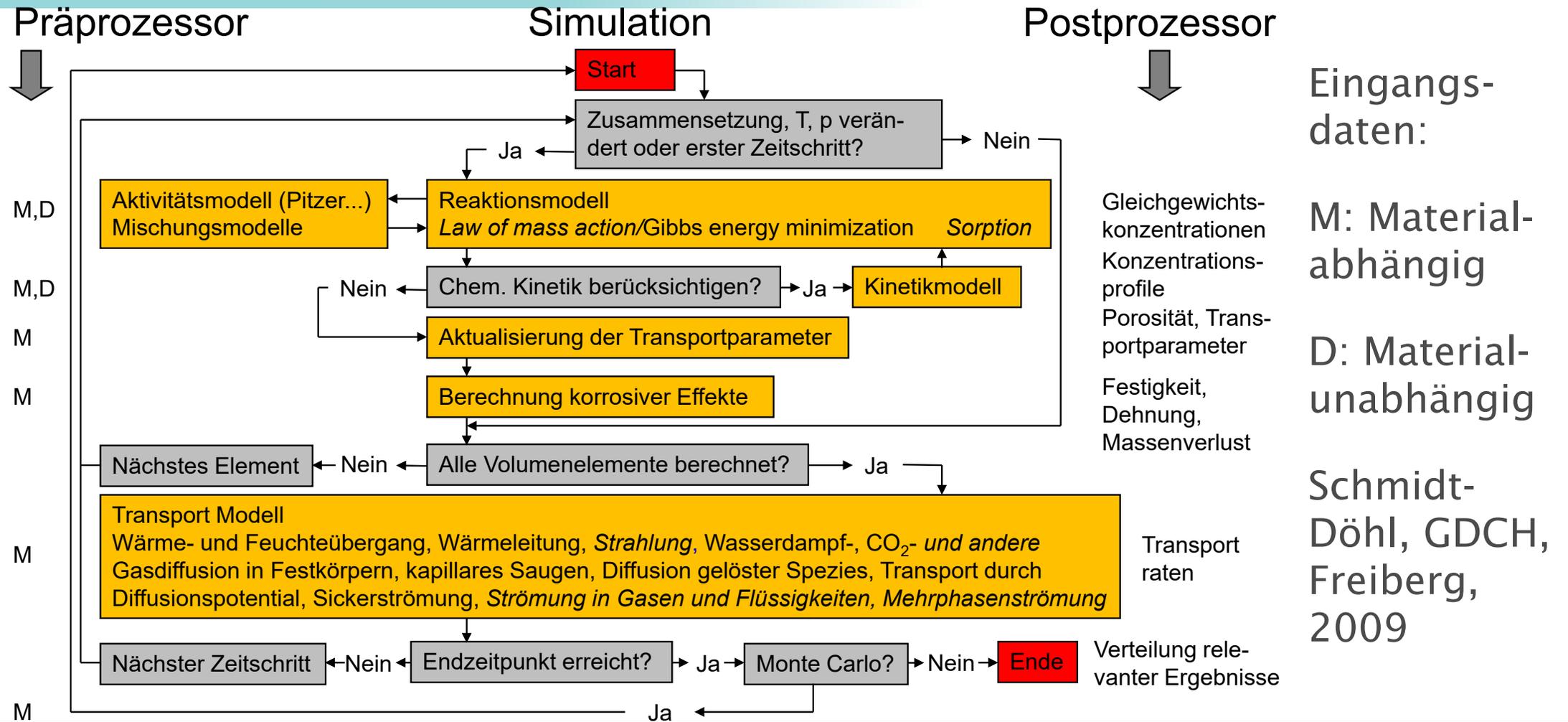
Der Autor
Anfang der
1990er Jahre
mit 386er
mit mathematischem
Koprozessor



Teilprozesse des Dauerhaftigkeitsproblems

- Transportprozesse im Porensystem der beteiligten Werkstoffe
- Ablaufende chemischen Reaktionen
- Resultierende korrosiven Effekte, z.B. die Bildung korrodierter Bereiche mit verminderter Festigkeit, Querschnittsverlust, veränderten Transportparametern, Dehnungen, Rissbildungen oder Bewehrungskorrosion und
- Veränderungen der Porosität und Porenstruktur durch die auftretenden chemischen Reaktionen in der korrodierten Randzone und deren Rückwirkung auf die Transportprozesse.

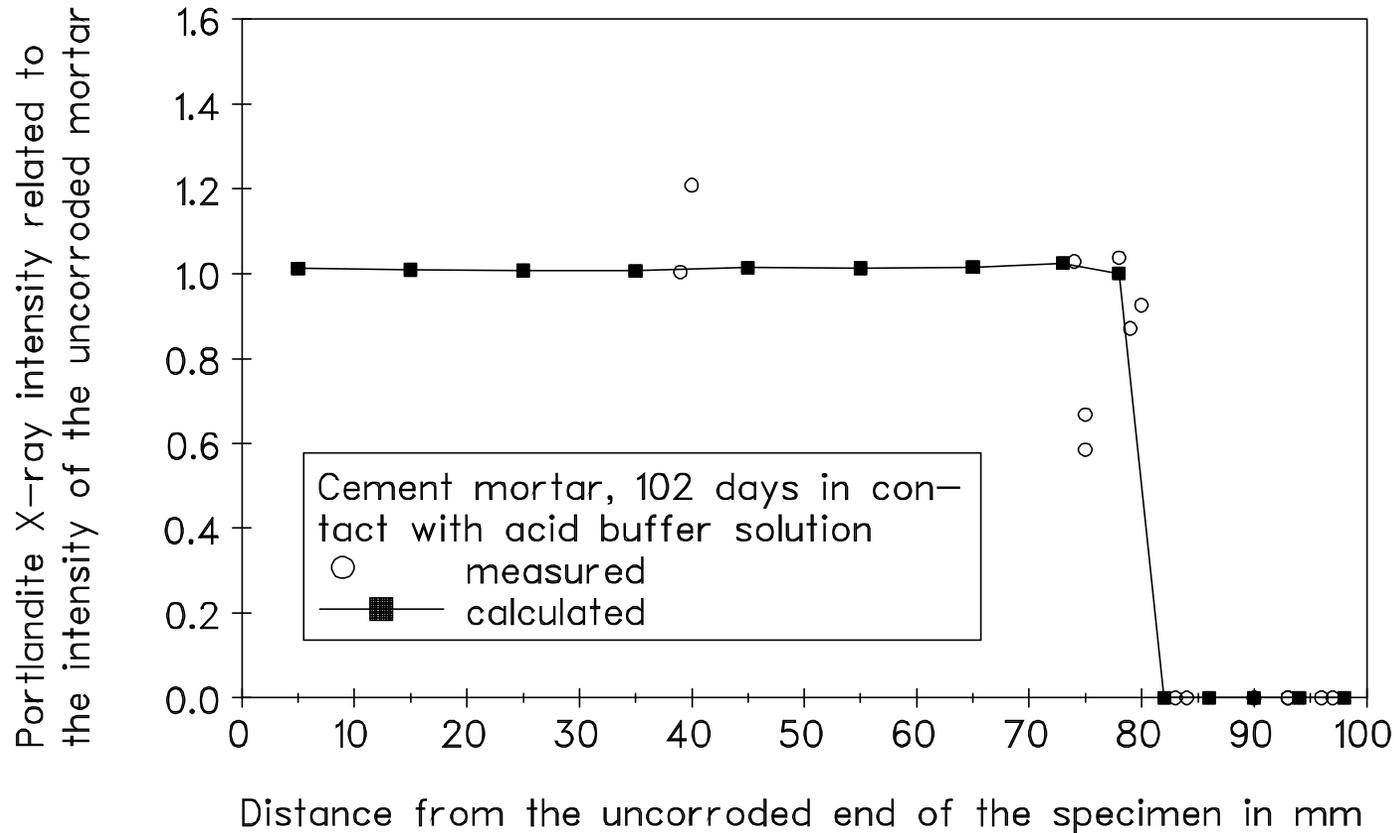
Grundstruktur Transport-Reaktions-Simulation (nicht reaktionsspezifisch)



Allgemeine Anmerkungen

- 1-, 2- oder 3-dimensionale Berechnungen nötig/möglich?
- Extrem hohe Stabilität wichtig
- Automatische Zeitschrittweitensteuerung günstig
- Parallelisierung möglich
- Numerische Lösungsverfahren für die zugrundeliegenden Gleichungssysteme: Differenzenverfahren oder Finite-Elemente-Methoden?
- In diese Fall günstig: Vorwärts-Differenzen-Verfahren (explizites Euler-Verfahren)

Allgemeine Anmerkungen



Ideal scharfe Korrosionsfront, typisch z.B. für Säureangriffe ohne Phasenneubildung

Nur abbildbar wenn das H^+ -Ion sofort wegreaktiert

Schmidt-Döhl & Rostásy, CCR, 1999

Kinetik wird ausschließlich von den Transportprozessen bestimmt!

T - Thermische Prozesse I

Prozess	Transportparameter
Wärmeleitung	Wärmeleitfähigkeit λ
Wärmeübergang an Bauteilgrenzen durch Strahlung und Konvektion	Konvektive Wärmeübergangszahl D Strahlungsübergangszahl M
Wärmespeicherung	Wärmekapazität M

T - Thermische Prozesse II

- Strömung und Konvektion in den Poren von Werkstoffen wird i.d.R. näherungsweise über die Wärmeleitfähigkeit mit berücksichtigt
- Konvektiver Wärmetransport lässt sich exakt nur mittels numerischer Strömungsmechanik rechnen
- Kopplung mit Feuchtetransport nötig, da Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität feuchteabhängig sind

H – Stofftransportprozesse I

Prozess	Transportparameter
Kapillares Saugen bzw. Weiterverteilen	Im einfachsten Fall kapillarer Flüssigkeitsaufnahme Koeffizient M
Laminare Strömung (Permeation)	Durchlässigkeitsbeiwert M
Feuchteübergang an Bauteilgrenzen bei Trocknung	Feuchteübergangskoeffizient D
Gasdiffusion	Diffusionswiderstandszahl im Trockenbereich M

H – Stofftransportprozesse II

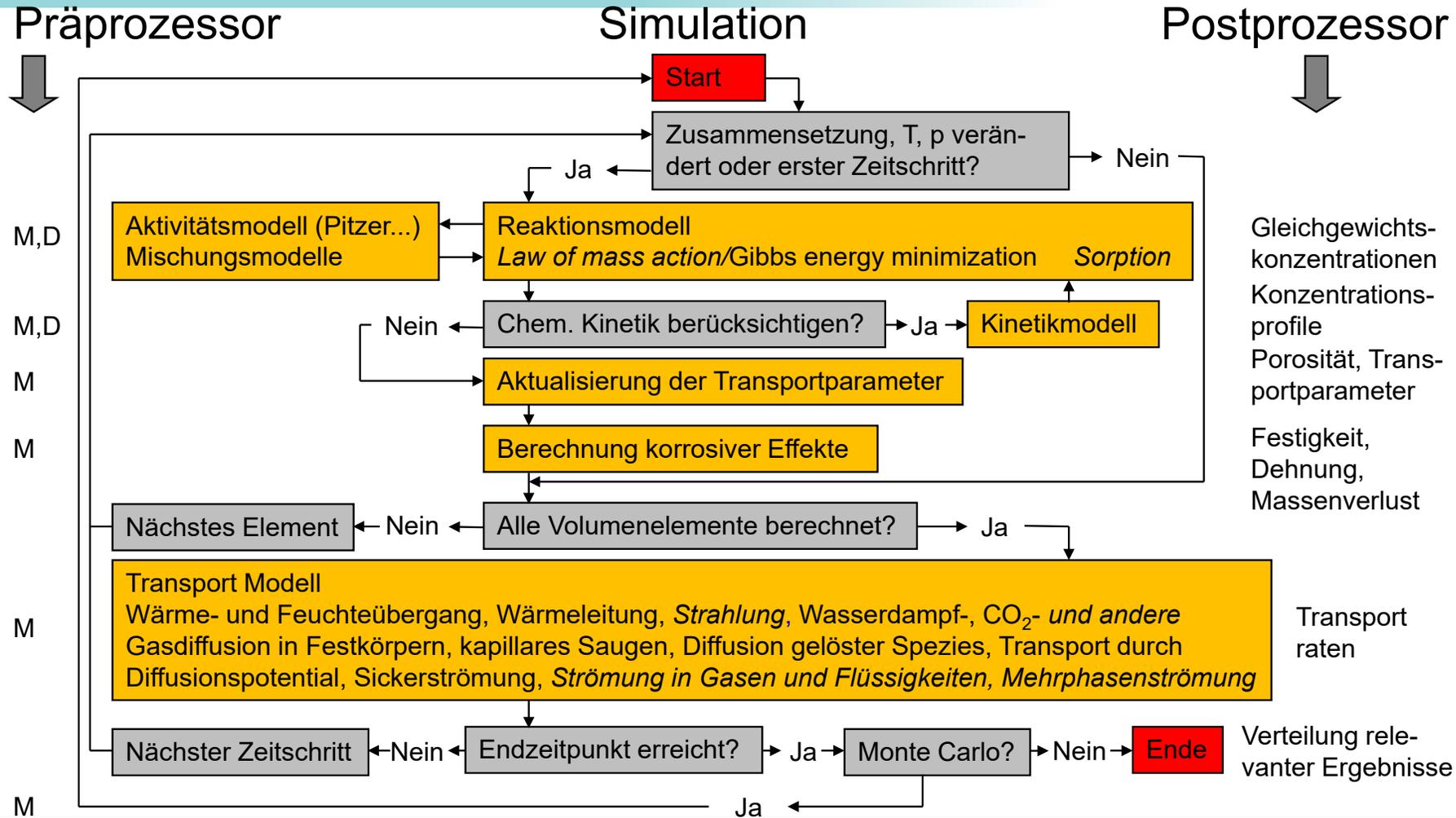
Prozess	Parameter
Huckepacktransport durch Permeation und Kapillarität	-
Diffusion gelöster Teilchen	Diffusionskoeffizienten M
Transport durch Diffusionspotential	-
Feuchtespeicherung	Feuchtespeicherfunktion M bestehend aus Sorptionsisotherme und Saugspannungskurve

H - Stofftransportprozesse III

- Alle Stofftransportprozesse sind abhängig vom Porenfüllungsgrad mit Flüssigkeit
- Beim kapillaren Weiterverteilen endet der Transport gelöster Spezies bei höherer Luftfeuchte als der Wassertransport
- Konzentrationsabhängigkeit der Diffusionskoeffizienten wird meist vernachlässigt
- Berechnung von Diffusionsprozessen gelöster Spezies unter Berücksichtigung des Einflusses des Diffusionspotentials mittels Nernst-Planck-Modell
- Berechnung turbulenter Strömungen nur mittels numerischer Strömungsmechanik

- Gibbs Energy Minimization (GEM):
Parameter: thermodynamische Standardgrößen (Gibbssche Energie, Standardbildungsenthalpie, Koeffizienten zur Berechnung der Wärmekapazität, molares Volumen)
Keine Vorkenntnisse über die ablaufenden Reaktionen erforderlich!
- Law of Mass Action Modelle (LMA):
Parameter: Gleichgewichtskonstanten der Reaktionen
Vorkenntnisse über die ablaufenden Reaktionen erforderlich!

Grundstruktur Transport-Reaktions-Simulation (nicht reaktionsspezifisch)



Eingangsdaten:

M: Materialabhängig

D: Materialunabhängig

Schmidt-Döhl, GDCH, Freiberg, 2009

C - Reaktionsprozesse II

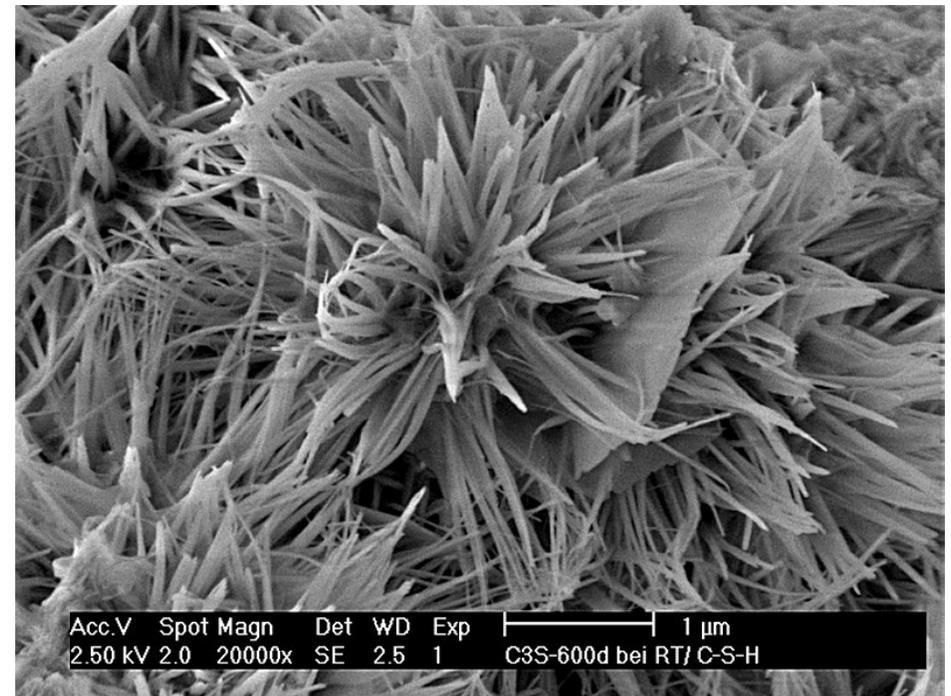
Mischphasen und Mischungsmodelle

In zementären Systemen mindestens 4 Mischphasen:

- Porenflüssigkeit: nichtideale Berechnung mit Hilfe des Pitzer Modells für das Lösungsmittel, die gelösten Ionen und Neutralteilchen
- C-S-H
- AFt
- AFm

Es treten Mischungslücken und Nichtidealität auf.

C-S-H
ESEM-
Bild
B. Möser
Weimar



C - Reaktionsprozesse III, thermodyn. Datensatz und Aktivitätsmodelle

- Thermodynamischer Datensatz hoher Qualität notwendig
Intern konsistent
- Aktivitätsmodell notwendig
In salinaren Systemen Pitzer-Modell mit entsprechenden Wechselwirkungsparametern unverzichtbar
- Thermodynamische Daten und Pitzer-Parameter können nur zusammen optimiert werden

Datensatz aus dem Thereda Langfristprojekt stellt wesentlicher Fortschritt für Simulationen in salinaren Systemen dar!

C - Reaktionsprozesse IV

thermodyn. Daten für Salzbeton (M4)

CNASH_{ss} ideale Mischbarkeit

SO₄-OH-AFm_{ss} Mischungslücke

Ettringit 30-32H₂O_{ss} ideale Mischbarkeit

SO₄-CO₃-AFt_{ss} Mischungslücke

Straetlingit-7-8H₂O_{ss} ideale Mischbarkeit

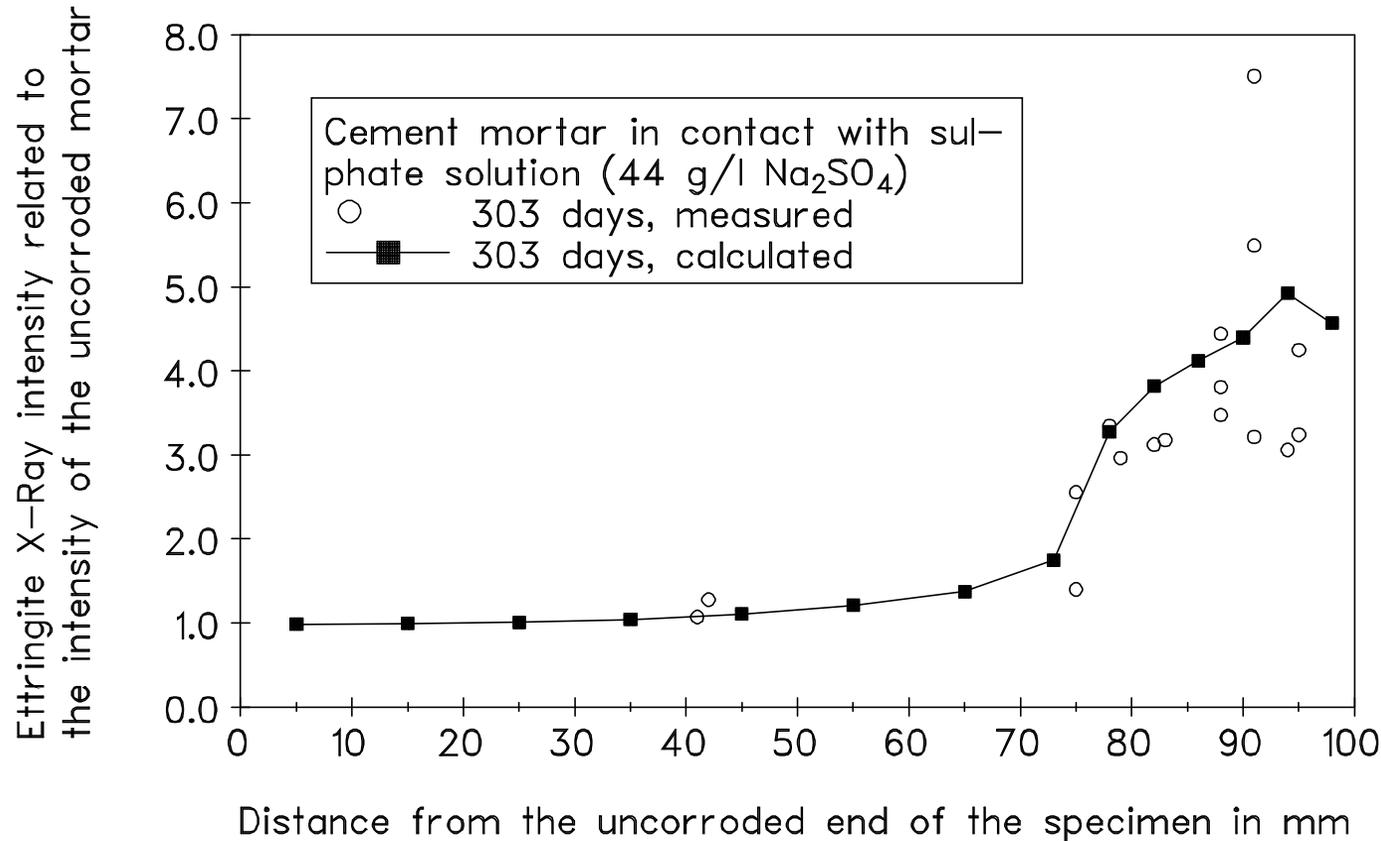
MgAl-OH-LDH_{ss} ideale Mischbarkeit

M-S-H_{ss} ideale Mischbarkeit

Plus zahlreiche Feststoffphasen mit fester Stöchiometrie

C - Reaktionsprozesse V

Berücksichtigung chemische Kinetik



Breite Korrosionsfront, typisch für Ettringitneubildung bei gleichzeitig schnellen Transportprozessen

Nur abbildbar unter Berücksichtigung der Reaktionskinetik zwischen Porenflüssigkeit und Porenwandung

Schmidt-Döhl & Rostásy, CCR, 1999

C - Reaktionsprozesse VI

Berücksichtigung chemische Kinetik

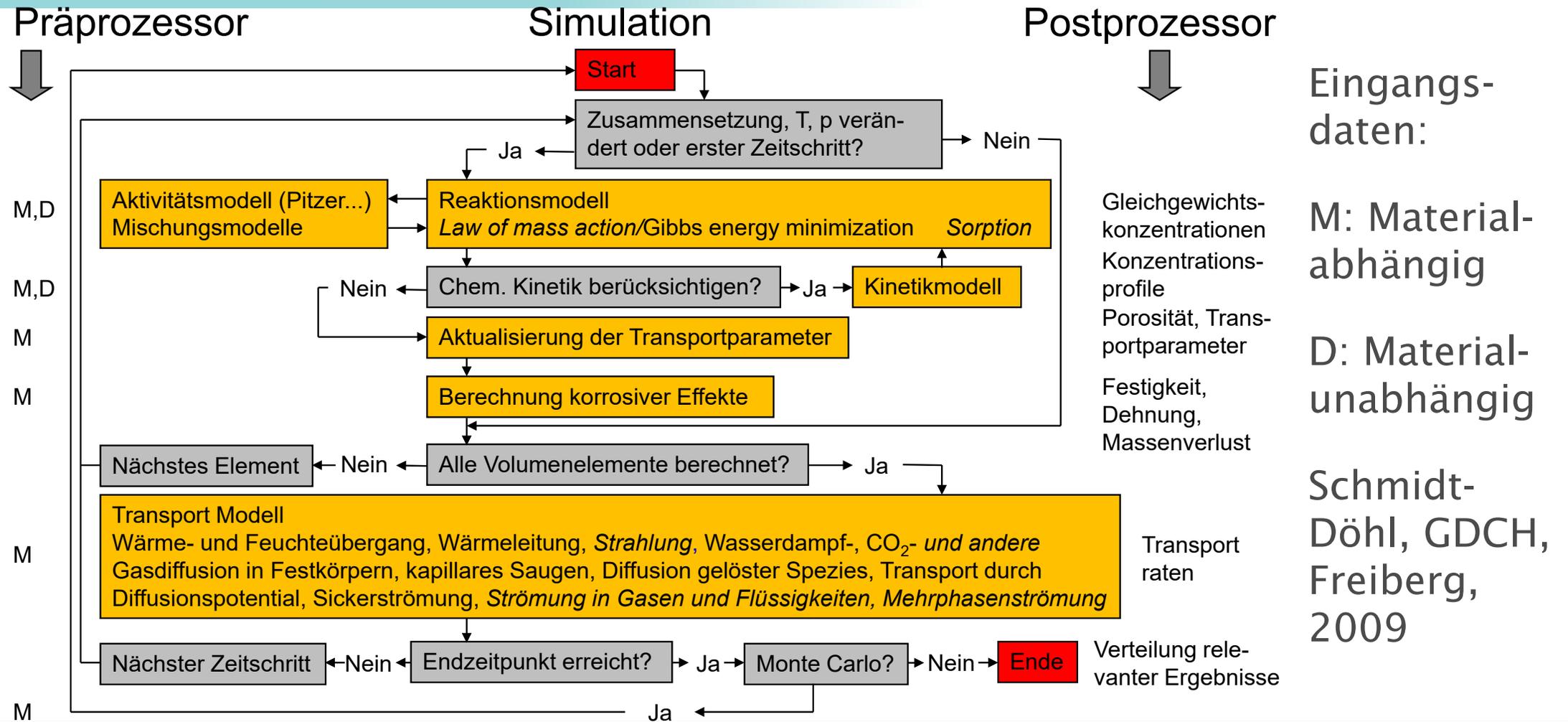
- Zuerst Berechnung des neuen thermodynamisch stabilen Phasenbestand
- Differenz des Phasenbestandes vor und nach der thermodynamischen Berechnung sind die ablaufenden Reaktionen
- Berechnung der thermodynamisch und kinetisch stabilen Konzentrationen K für reaktionsspezifische Substanzen, z.B. Sulfatkonzentration im Falle einer Ettringitneubildung
- Nutzung der Konzentrationen K als zusätzliche Randbedingung für die erneute thermodynamische Optimierung

C - Reaktionsprozesse VII

Berücksichtigung chemische Kinetik

- Die innere Oberfläche für die jeweilige Reaktion ist zu berücksichtigen (Diffusion/Kapillarleitung)
- Die Geschwindigkeitskonstanten der beteiligten Reaktionen müssen bekannt sein

Grundstruktur Transport-Reaktions-Simulation (nicht reaktionsspezifisch)



Rückwirkung auf Porenstruktur und Transporte

- Porositätsveränderungen sind über die Dichten und Konzentrationen der festen Spezies berechenbar
- Nutzung von Gleichungen z.B. von Gaber (1989) zur entsprechenden Korrektur der Transportkenngrößen
- Transportkenngrößen im unkorrodierten Zustand müssen bekannt sein
- Porositätskenngrößen im unkorrodierten Zustand ε_{HG} , ε_{WA} , ε_{VE} , ρ_{tr} , u_f müssen bekannt sein
- Porenstrukturveränderungen sind sehr viel schwieriger zu berechnen, erste Ansätze durch Goedeke (2018)

Korrosive Effekte, Kopplung mit mechanischen Prozessen

- Massenverlust über die Konzentrationen und Dichten berechenbar
- Festigkeitsverlust über das Balshin-Modell bei Kenntnis der charakteristischen Festigkeiten und Konzentrationen der Feststoffphasen berechenbar
- Ablösung von Material bei Unterschreiten einer Mindestfestigkeit durch Tausch von Ortselementen berechenbar
- Treibdehnungen über ein Dehnungsmodell bei Ettringitneubildung bei Kenntnis der Porenradienverteilung berechenbar
- Rissbildung bei Überschreiten der Grenzzugbruchdehnung berechenbar

Probabilistische Dauerhaftigkeitsmodellierung

Ein probabilistisches Modell benötigt die statistische Verteilung der Eingangsgrößen und liefert damit die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der berechneten Größen

Schädigungsmodell und Definition der Schädigungstiefe muss vorhanden sein

Grenzzustände und zulässige Versagenswahrscheinlichkeit müssen bekannt sein

FORM/SORM-Methodik oder Monte-Carlo-Simulation (Rigo, 2005) anwenden

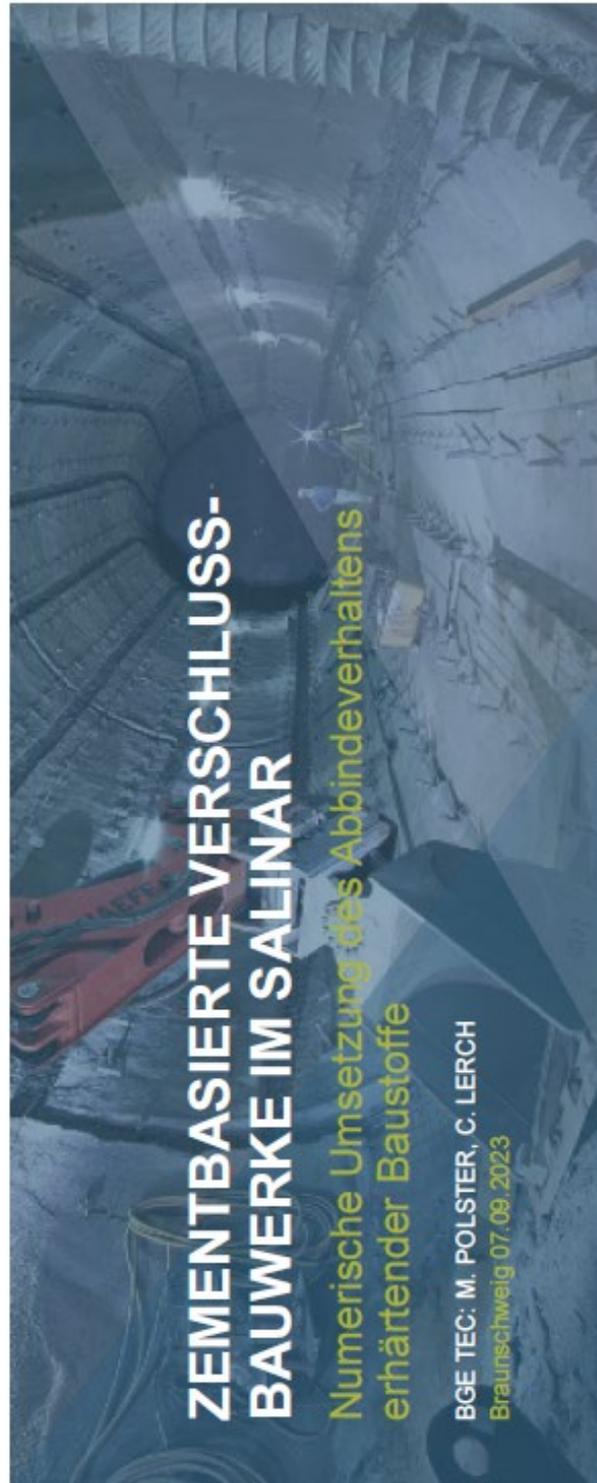
- Die Veränderung der Transportparameter während des Korrosionsprozesses, Dichten sind essentiell
- Die Simulation kapillarer Transportprozesse im korrodierten Bereich, insbesondere auch in gerissenen Bereichen
- Prozesse bei denen ein Material erst dichter wird, dann poröser
- Berechnung von Dehnungen und Rissbildungen durch Treiben
- Fehlende oder inkonsistente thermodynamische Daten
- Asymmetrien in symmetrischen mehrdimensionalen Problemen, die aufgrund von begrenzter Rechengenauigkeit unvermeidbar sind

- Zusammensetzung des angreifenden Mediums
- Phasenbestand des unkorrodierten Baustoffs
- Veränderungen des Phasenbestandes im Gleichgewicht mit dem angreifenden Medium bei definierten Feststoff-Lösungsverhältnissen
- Untersuchungen des Reaktionspfades, z.B. mit Hilfe von Kaskadenexperimenten
- Korrosionsexperimente mit sinnvoll gewählten Randbedingungen und Transportprozessen

- THCM-Modellierungen sind unverzichtbare Methoden in der Endlagersicherheitsforschung u.a.
- Die Ermittlung der Eingangsdaten und die Berechnungen sind aufwändig
- Die Situation im Bereich thermodynamischer Eingangsgrößen hat sich durch Thereda bereits wesentlich verbessert
- Berechnete Ergebnisse haben sich im Vergleich mit verschiedensten Ergebnisse aus Laborversuchen immer wieder als recht zuverlässig herausgestellt
- Aufgrund amorpher Phasen und sehr dichten Baustoffen ist die Ermittlung experimenteller Vergleichsdaten nicht einfach

2.16

M. Polster, C. Lerch, A. Carstensen, M. Heydorn, M. Herklotz, A. Hussein, N. Müller-Hoeppe, T. Schröpfer und A. Weis: **Numerische Umsetzung des Abbindeverhaltens erhärtender Baustoffe**



ZIELSTELLUNG

- Numerische Simulation im Kontext eines Endlagers zielen auf
 - Prozessverständnis für die Entwicklungen an einem Bauwerk
 - Untersuchung und Bewertung von Beanspruchungszuständen
 - Nachweis- und Genehmigungsfähigkeit von geotechnischen Barrieren
 - Ableitung des Systemverhaltens als Eingangsgröße bei Langzeitsicherheitsnachweisen
- Notwendigkeit einer qualifizierten Abbildung des beobachteten Verhaltens, hier in Form von thermischem und mechanischem Materialverhalten
 - 1) Anforderungsgerechter Baustoff: → *J. Engelhardt: Strategie der Baustoffentwicklung*
 - 2) Adäquate Versuche → *F. Rempel: State of the Art am Beispiel EMO*
 - 3) Praxistauglichkeit des Baustoffs → *N. Müller-Hoeppe: Zusammenfassung der Erfahrungen aus dem Barrierebau mit abbindenden Baustoffen*
 - 4) Geeignete numerische Werkzeuge → *M. Polster: Numerische Umsetzung des Abbindeverhaltens erhärtender Baustoffe*

NUMERISCHE UMSETZUNG DES ABBINDEVERHALTENS ERHÄRTENDER BAUSTOFFE

Zur Rechenbarkeit der
Baustoffe bei Anwendungen
der Asse und des ERAMs



PROBLEMBESCHREIBUNG



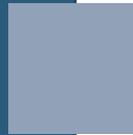
PROZESSKLASSEN (EINWIRKUNGEN)



STOFFMODELL

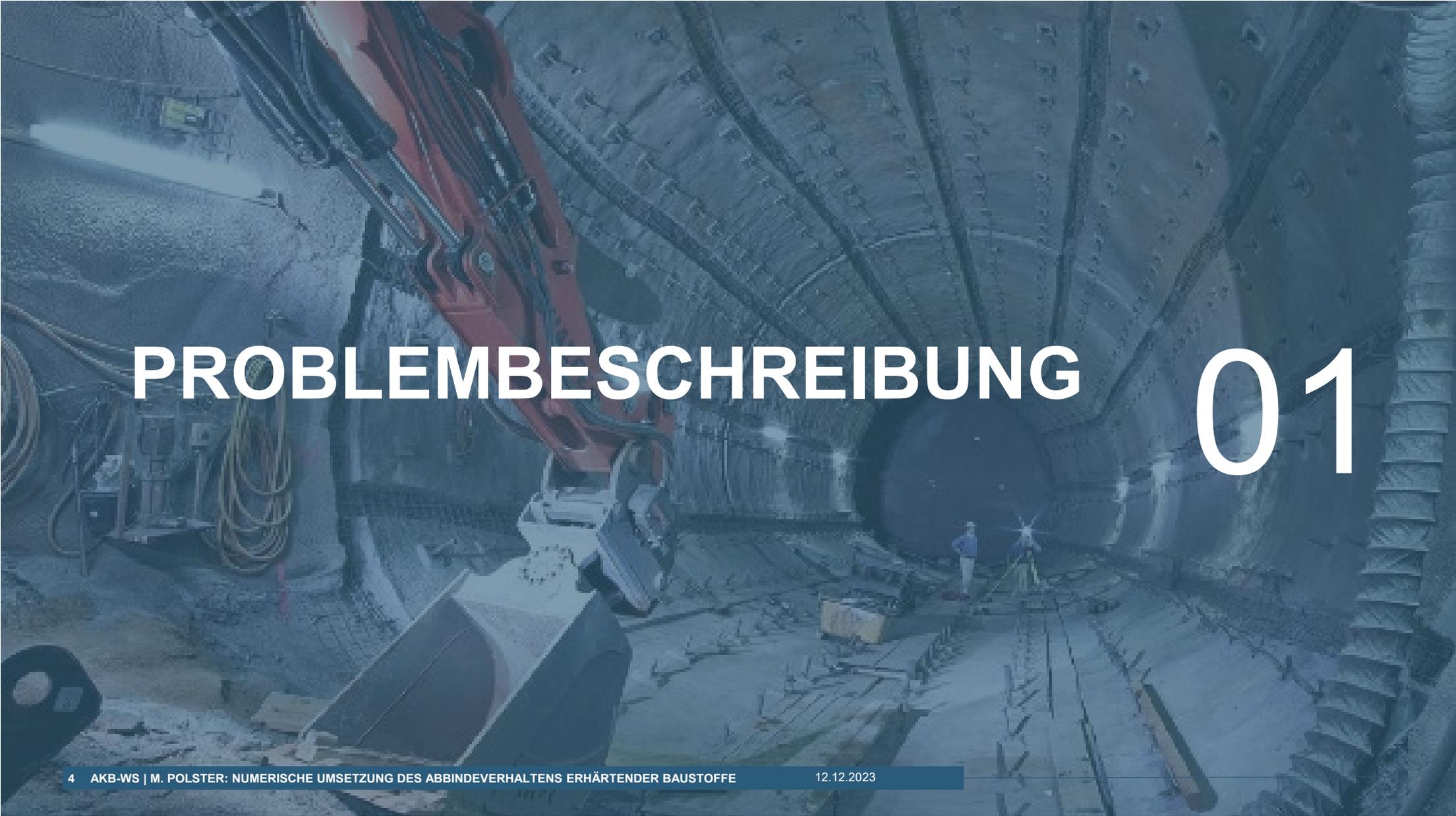


ANWENDUNGEN



ZUSAMMENFASSUNG

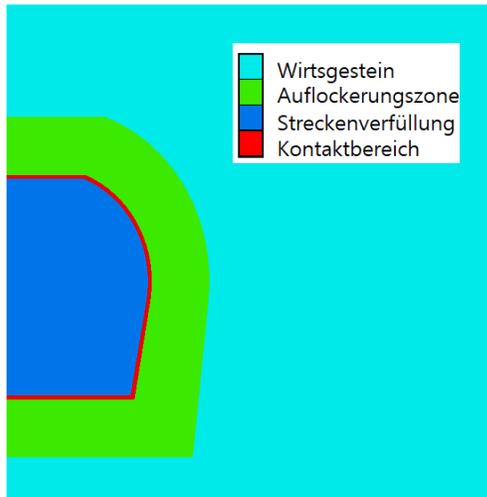


A large tunnel under construction, featuring a red excavator in the foreground and workers in the distance. The tunnel walls are lined with concrete segments, and the floor is covered with construction materials and debris. The scene is dimly lit, with some work lights visible.

PROBLEMBESCHREIBUNG

01

PROBLEMBESCHREIBUNG THM-SIMULATION (FERNZIEL)



Numerische Simulation THM

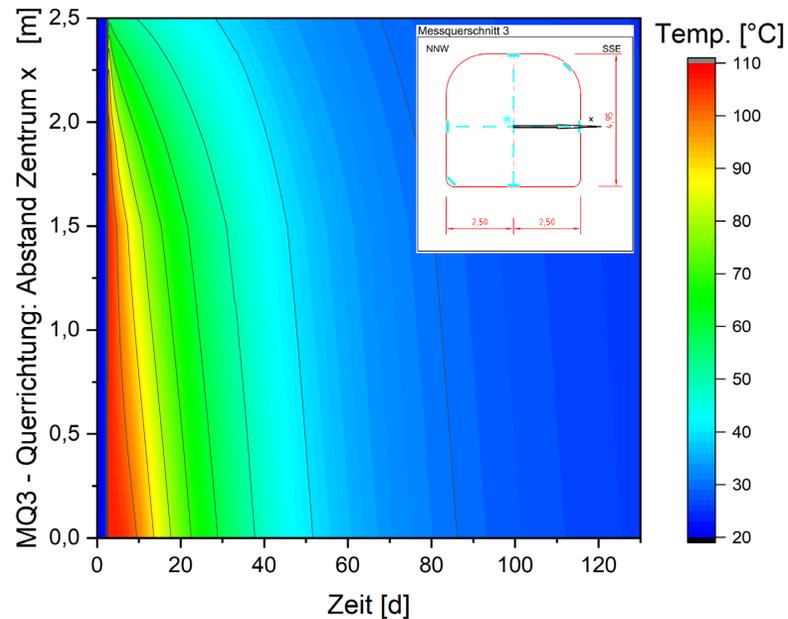
- Beschreibung der relevanten (gekoppelten) Prozesse
- Beschreibung des kurz- und langfristigen Verhaltens der Barrieren

! Abdichtbauwerke als „hydraulische Parallelschaltung“ der Elemente Wirtsgestein, Auflockerungszone, Kontaktzone, Baukörper

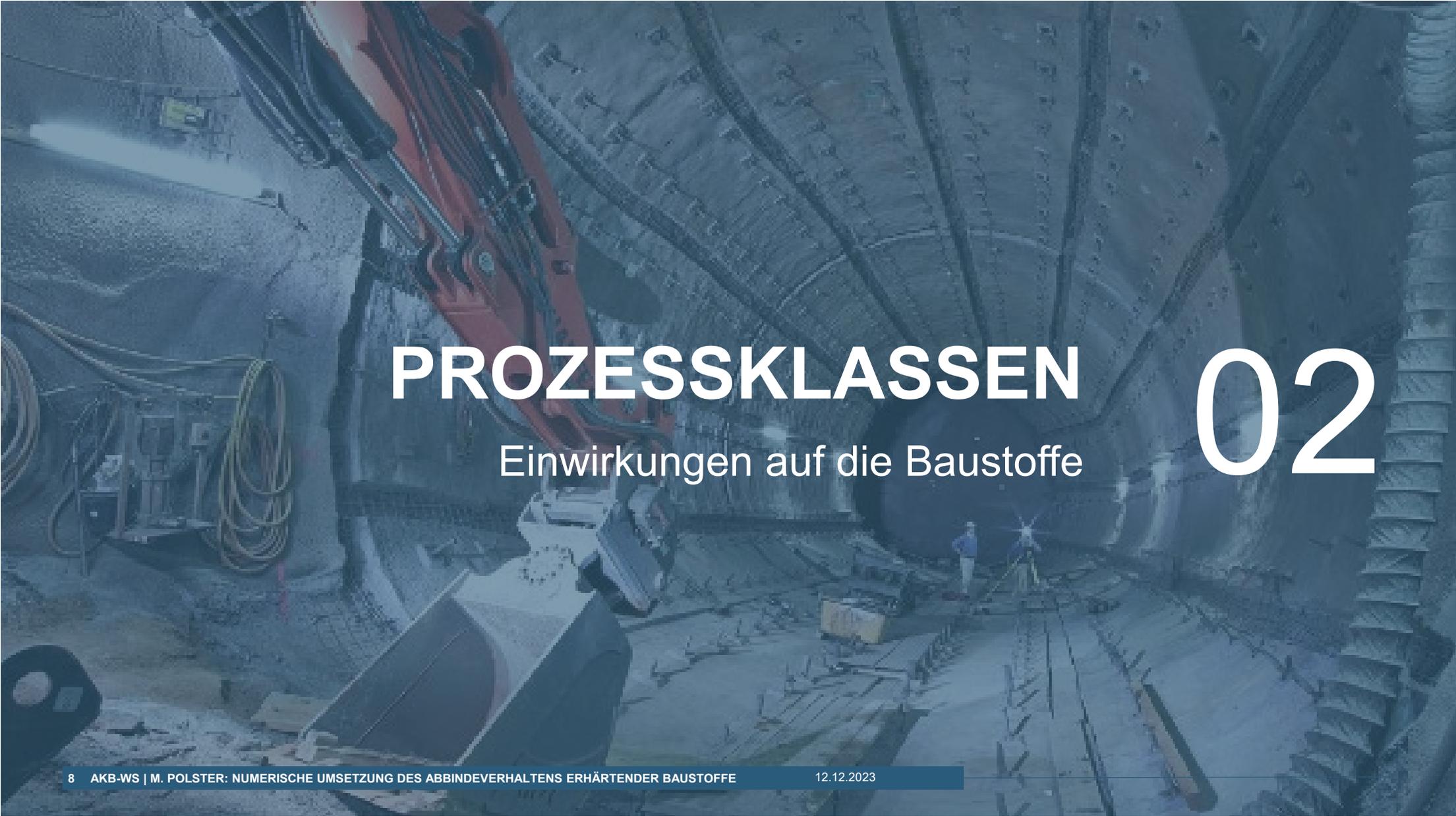
! Wechselwirkung(en) des Gebirges mit dem Baukörper

PROBLEMBESCHREIBUNG TEMPERATURAUSBREITUNG

ERAM – In-situ Bauwerk im Anhydrit Temperaturverhalten im Horizont x über Zeit



- Prognose A1
- Horizontaler Auswertehorizont x mittig und quer zur Streckenachse
- Betonage (gegenüber Beginn Kernbarriere (0 d)):
 - Zeitraum für Widerlager: -19 d ... -7 d
 - Niveau Auswertehorizont: 1,6 d
- Ausgangstemperaturen:
 - Gebirge 20 °C
 - Baustoff 22°C

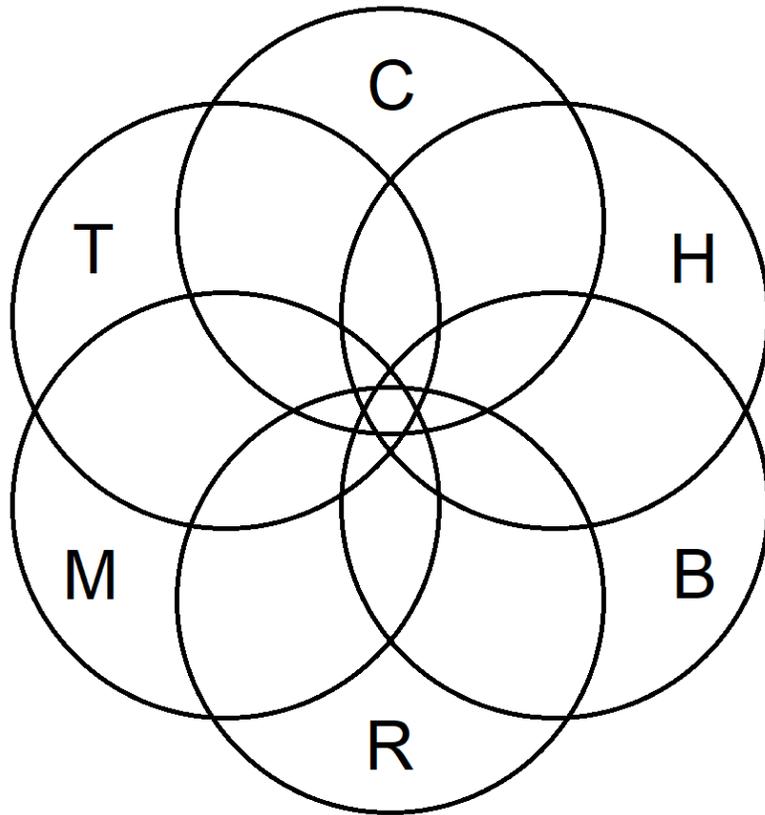


PROZESSKLASSEN

Einwirkungen auf die Baustoffe

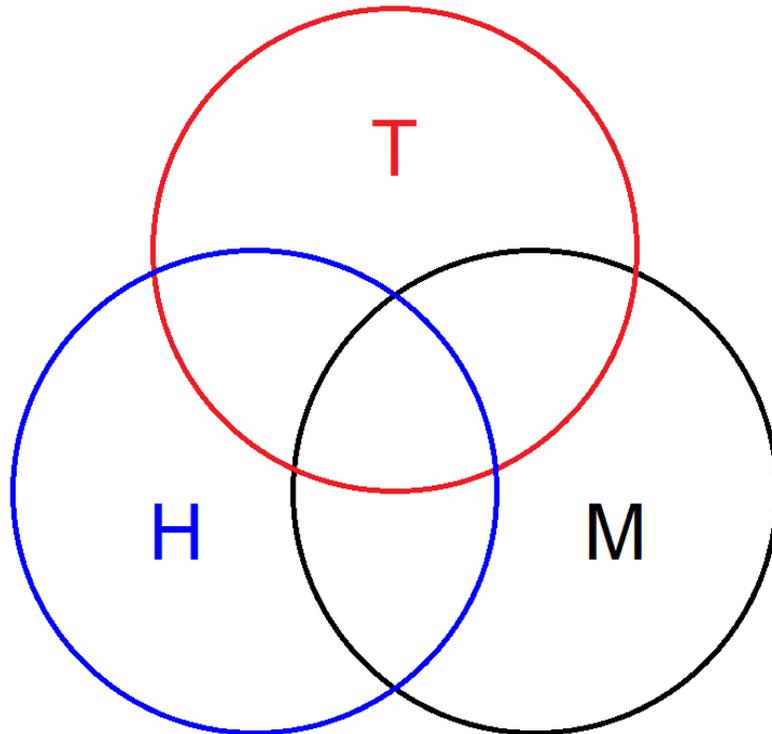
02

EINWIRKENDE PROZESSKLASSEN (PC)



T: thermisch
H: hydraulisch
M: mechanisch
C: chemisch
R: radiologisch
B: biologisch

REDUKTION DER PC_s IN NUMERISCHER BERECHNUNG



PC	Prozessverhalten
C→T:	<ul style="list-style-type: none"> ➤ Erhärtung als chemisch motivierter Prozess wird auf thermische Wirkung reduziert: Einphasenmodell ➤ Wandlung instabiler Phasen (Nachreaktion) bleibt unberücksichtigt
H→T:	<ul style="list-style-type: none"> ➤ Verbrauch freien Wassers wird implizit über Materialfunktion berücksichtigt
H→M:	<ul style="list-style-type: none"> ➤ Verbrauch freien Wassers während Erhärtung bleibt unberücksichtigt (Entsättigung von Poren) ➤ Feuchte(film) wird bei einzelnen Teilprozessen als Ursache angenommen, aber nicht mit modelliert

Numerik

- Schwache Kopplung: Im jeweiligen Zeitschritt einmalige Lösung der PC
- Hydraulisches Verhalten kann z. B. als Transportprozess berücksichtigt werden
- Porosität ist keine Feldvariable



STOFFMODELL

03

Thermisches und mechanisches Materialverhalten

THERMISCHES STOFFMODELL

Wärmeleitungsgleichung

$$\varrho c_p \dot{T} = \lambda \nabla^2 T + \dot{Q}_c$$

ϱ : Dichte

c_p : massespezifische Wärmekapazität
 $c_p = c_p(\alpha, T)$

T : Temperatur

λ : Wärmeleitfähigkeit
 $\lambda = \lambda(\alpha, T)$

\dot{Q}_c : volumenspezifische Wärmefreisetzungsrate
 $\dot{Q}_c = f(\dot{Q}_c, \alpha_{max}, T_{max})$

α : Erhärtungsgrad

Wärmequellterm

$$Q_c(t_e(t)) = C Q_{ce}(t_e(t))$$

$$C Q_{ce,max} = \varrho c_p \Delta T_{ce,max}$$

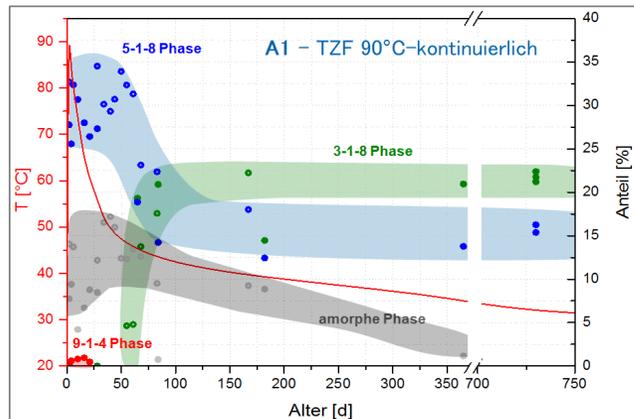
$$\alpha(t_e(t)) = \frac{Q_{ce}(t_e)}{Q_{ce,max}} = \frac{Q_c(t_e)}{Q_{c,max}} = \frac{\Delta T_a(t_e)}{\Delta T_{a,max}}$$

$$\alpha(t_e(t)) = e^{-\left(\ln\left(1 + \frac{t_e(t)}{t_1}\right)\right)^b}$$

$$t_e(t) = \int_0^t e^{\frac{E_A(T)}{R} \left(\frac{1}{T_{Ref}} - \frac{1}{T}\right)} d\tau$$

THERMISCHES STOFFMODELL

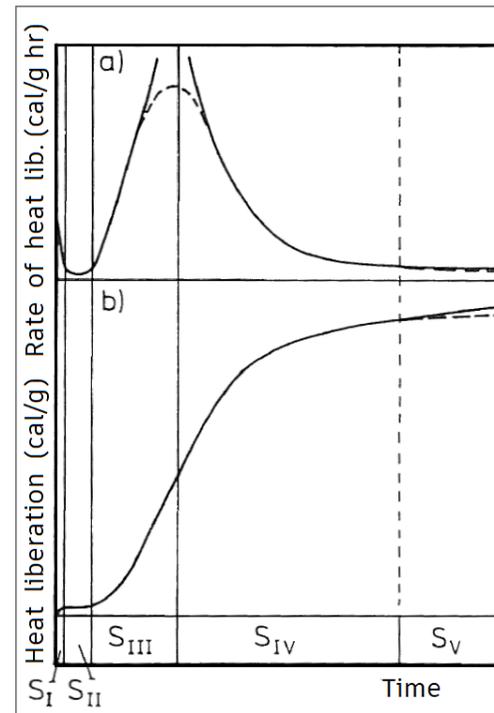
Phasenbestand D. Freyer, I. Paschke



Quellen:

[PAS 15], [BYF 80]

Modell der Entwicklungsphasen nach Kondo&Ueda



Thermisches Modell

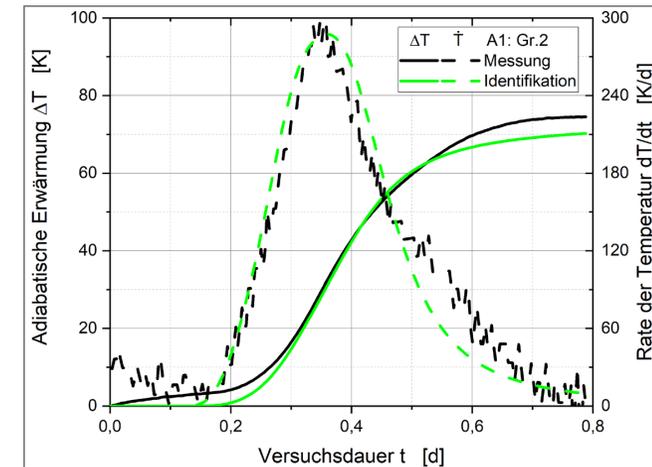
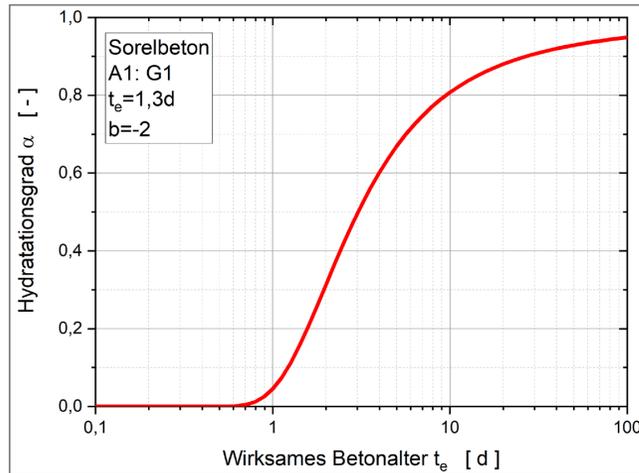


Abbildung der Phasen S_{III} bis S_V :

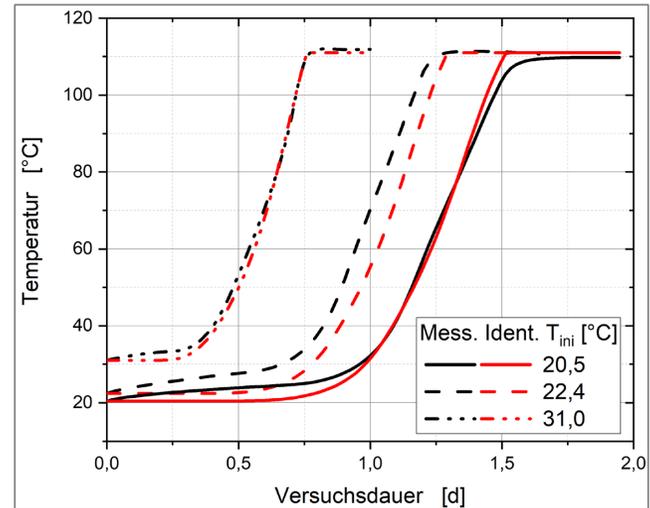
- S_{III} : Beschleunigungsphase
- S_{IV} : Verzögerungsphase
- S_V : Ausklingphase

THERMISCHES STOFFMODELL ANPASSUNG SORELBETON A1

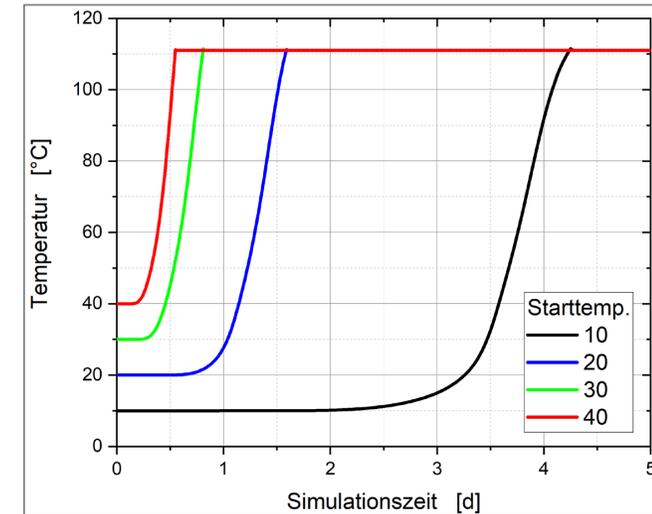
Zusammenhang zwischen inneren Zustandsvariablen



Identifikation – Anpassung adiabatisches Verhalten



Adiabatisches Modellverhalten abh. von Starttemperatur



THERMISCHES STOFFMODELL

ZUSAMMENFASSUNG

- Reduktion des chemischen Vorgangs auf die thermische Wirkung
- Erhärtung als einphasige Reaktion
- Hydratationsgrad und Wirksames Betonalter sind gleichwertige innere Zustandsvariable des Erhärtungsprozesses
- Entwicklung der inneren Zustandsvariablen bestimmt Verhalten der weiteren Entwicklung von Teilprozessen
- Begrenzung der thermischen Reaktion durch Limitierung in Temperatur und/oder Hydratationsgrad möglich

MECHANISCHES STOFFMODELL

Additive Zerlegung des Tensors der Verzerrungsrate in Teilprozesse

$$\dot{\epsilon} = \sum \dot{\epsilon}_i = \dot{\epsilon}_{el} + \dot{\epsilon}_{pl} + \dot{\epsilon}_a + \dot{\epsilon}_v + \dot{\epsilon}_{th}$$

$\dot{\epsilon}_{el}$: Elastizität (zeitinstantan)

$\dot{\epsilon}_{pl}$: Zeitinstantane Plastizität

$\dot{\epsilon}_a$: Autogenes Quellen/Schwinden

$\dot{\epsilon}_v$: Zeitabhängige Deformation

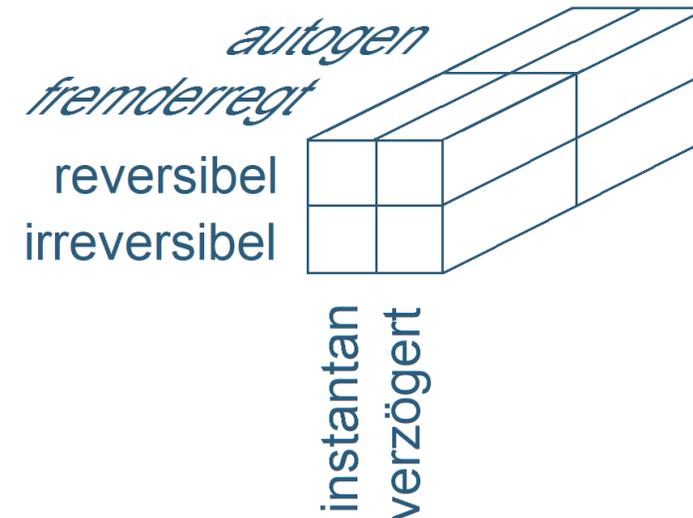
$\dot{\epsilon}_{th}$: Thermische Ausdehnung

Bislang unberücksichtigte Teilprozesse

- Trocknungsschwinden
- Kompaktionskriechen

Charakterisierung der Teilprozesse

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_{rev} + \dot{\epsilon}_{irr} = \dot{\epsilon}_{inst} + \dot{\epsilon}_{time} = \dot{\epsilon}_{auto} + \dot{\epsilon}_{ext}$$



MECHANISCHES STOFFMODELL INSTANTANE PLASTIZITÄT

- Uniaxiale Festigkeiten

$$\sigma_x(\alpha) = \max\left(\sigma_{xe} \left(\frac{\alpha - \alpha_0}{1 - \alpha_0}\right)^{n_x}; \sigma_{x,min}\right)$$

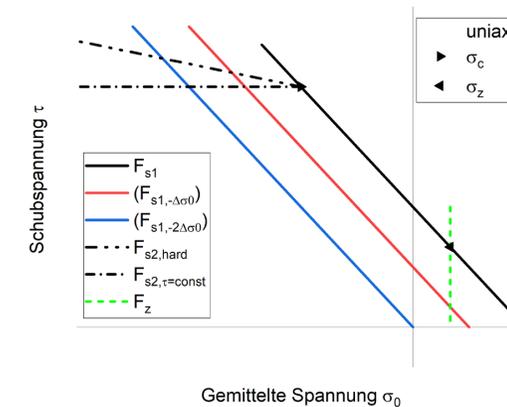
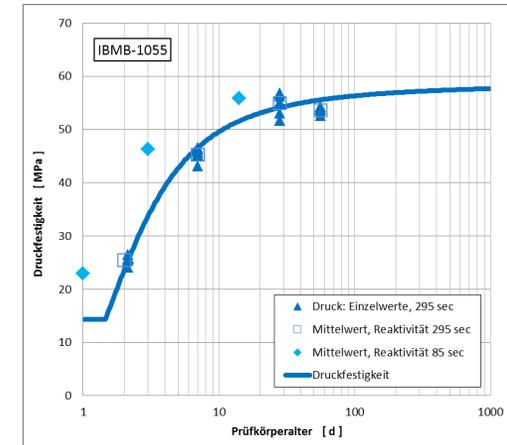
$x=c$: Druckfestigkeit; $x=t$: Zugfestigkeit; $\sigma_c/\sigma_t = f(\alpha) \approx 10$

- Drucker-Prager

$$F_s = \tau + q_\phi(\alpha) \sigma_0 - k_\phi(\alpha)$$

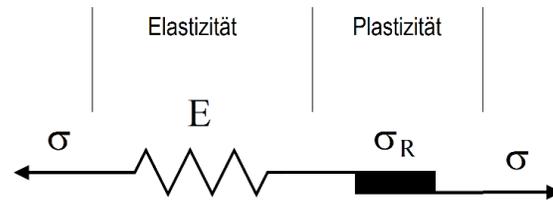
$$q_\phi(\alpha) = \sqrt{3} \frac{\sigma_c(\alpha) - \sigma_t(\alpha)}{\sigma_c(\alpha) + \sigma_t(\alpha)}$$

$$k_\phi(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\sigma_c(\alpha) \sigma_t(\alpha)}{\sigma_c(\alpha) + \sigma_t(\alpha)}$$

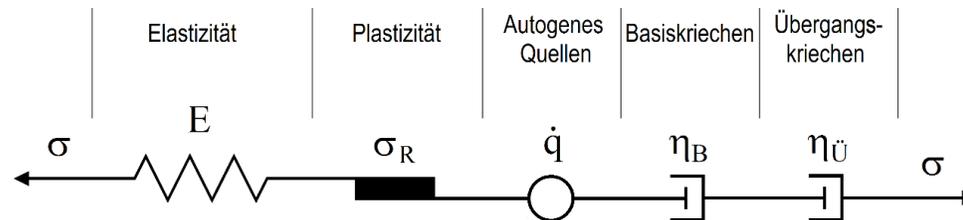


MECHANISCHES STOFFMODELL ENTWICKLUNGSTUFEN

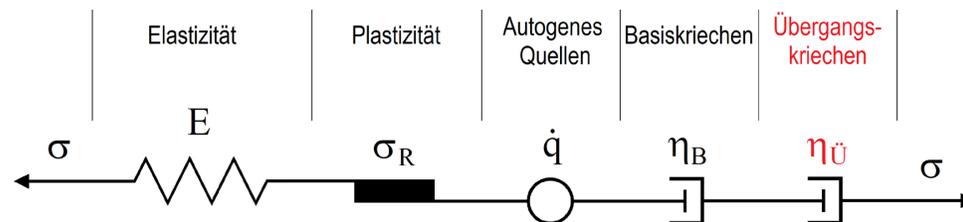
ICEM-Modell
[ENG 03]



Stand Stoffmodell
Sorelbeton A1



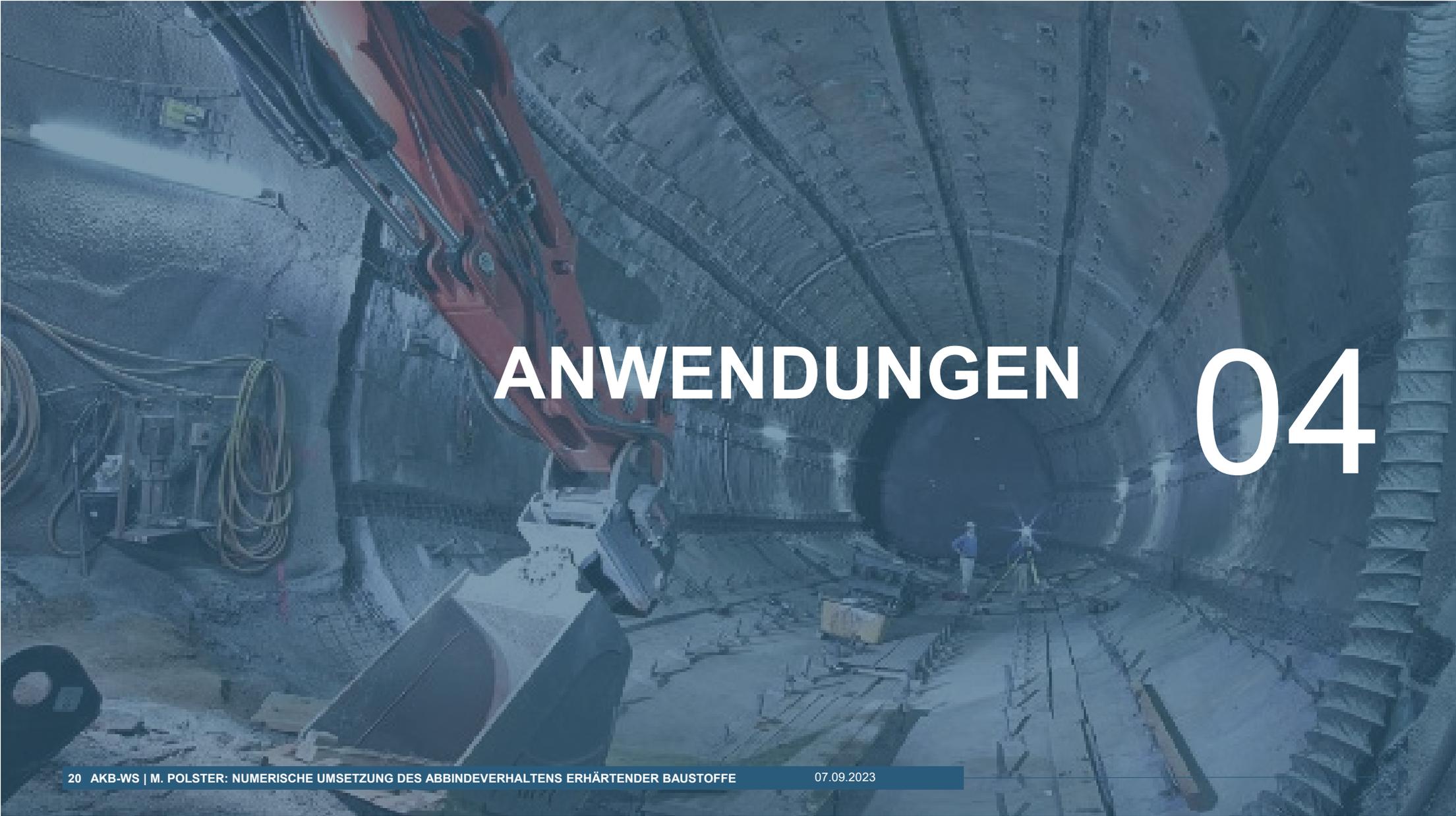
Geplante Modifikation
F&E-Vorhaben UVerStoff
[MÜL 21]



MECHANISCHES STOFFMODELL ZUSAMMENFASSUNG



- Abbildung der mechanischen Prozesse während des Abbindeverhaltens ist durch bekannte Materialmodelle bzw. Weiterentwicklungen dieser möglich
- Kopplung der zeitlichen Entwicklung mechanischer Eigenschaften an die inneren Zustandsvariablen
- Nachweisziel ist die Rissbeschränkung, d. h. ein sicherer Abstand zum Risskriterium
- Schwerpunkt ist die Erfassung der schädigungsfreien Prozesse, kein Rissmodell
- Auftretende Plastizität bedeutet Schädigung im Bauwerk



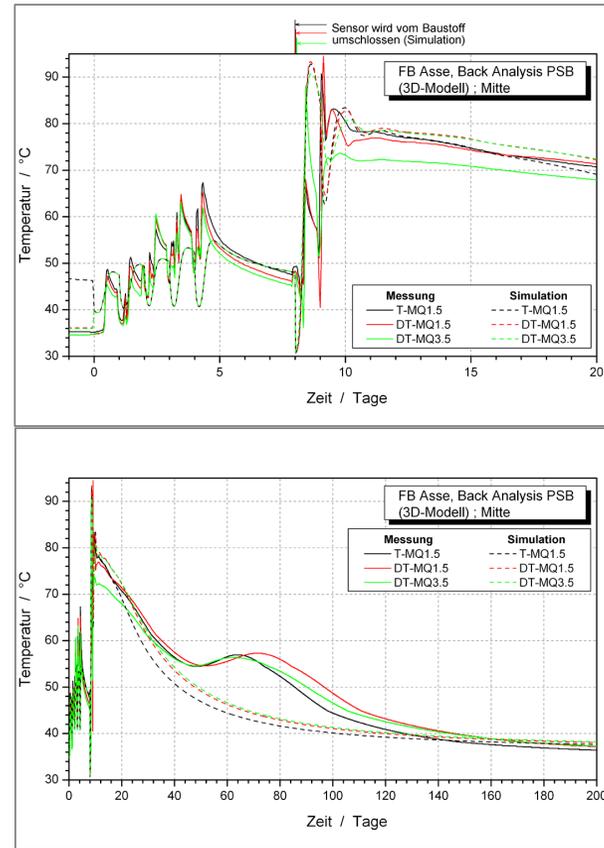
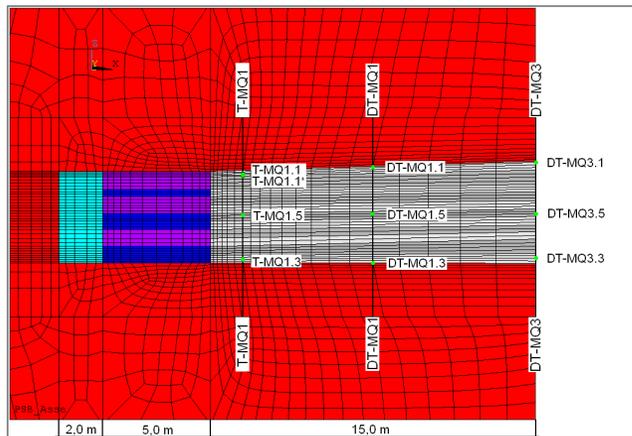
ANWENDUNGEN

04

ANWENDUNGEN

- Sorelbeton 29.6 A2
 - Kavernenhals Asse - Vorauslegung (T), spätere Bauausführung in 29.6 A2 & A1
 - Pilotströmungsbarriere PSB-A2 Asse (T)
- Salzbeton M2 (M3)
 - Analysen der Standsicherheit und Integrität Stilllegung ERAM (TM)
 - Analyse bGZ ERAM (TM)
 - In-situ-Versuch Abdichtbauwerk im Steinsalz ERAM (TM)
- Sorelbeton A1
 - Bauwerk im Carnallit BW-K2C Asse (T)
 - Blindschacht 4 (BS 4) Asse (TM)
 - Pilotströmungsbarriere PSB-A1 Asse (TM)
 - F&E-Projekte: z. B. STROEFUN

ANWENDUNGEN PSB-A2 (T)

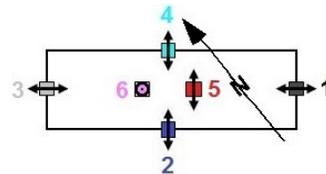
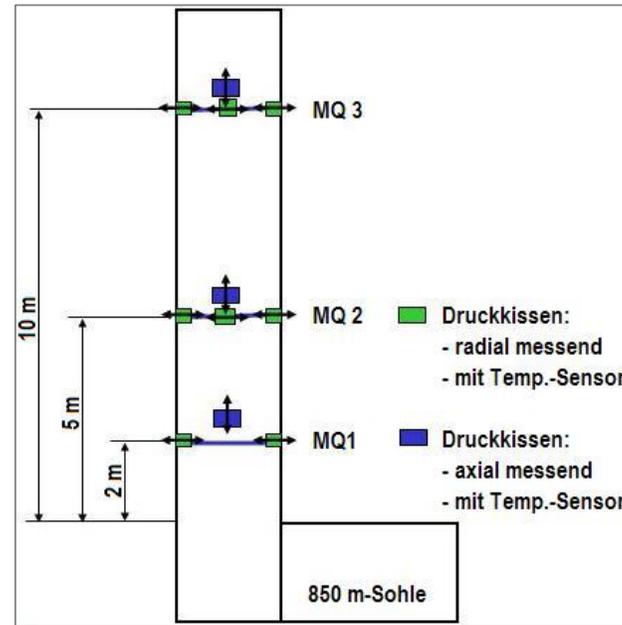
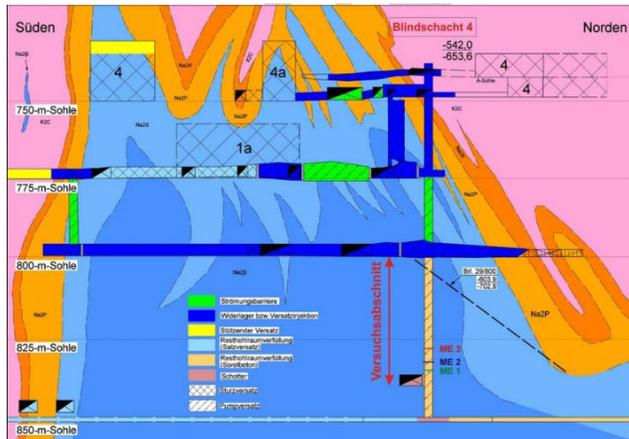


Pilotströmungsbarriere PSB-A2

- Gute Approximationsgüte des thermisch besonders aktiven Zeitbereichs der Erhärtung
- Vereinfachter thermischer Energietransport in Luft
- Begrenzte Approximationsgüte während Konvektion (Messsensor noch nicht vom Baustoff umgeben)
- Nachreaktion bleibt unberücksichtigt

ANWENDUNGEN

BS 4 (TM) – KONFIGURATION

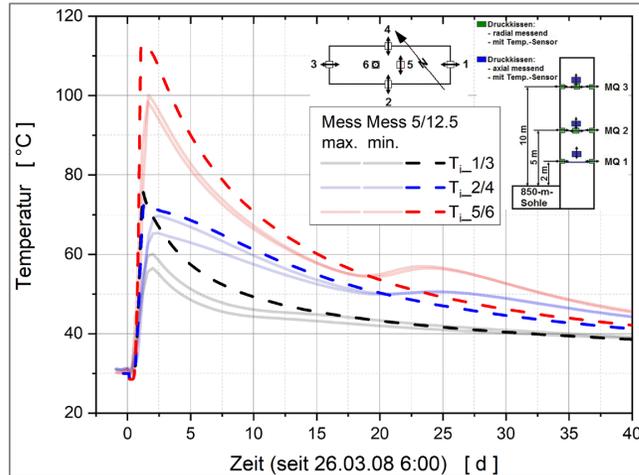


Blindschacht 4 (BS 4)

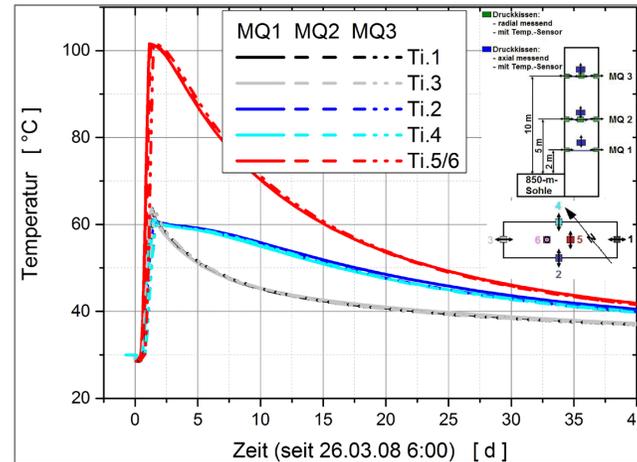
- Abteufung 1913
- Rechteckquerschnitt ca. 6,5m x 2,5m (750-m-Sohle bis 850-m-Sohle)
- anstehendes Gebirge Hauptsalz
- Ausbaufrei
- Wetterschacht
- Versuchsbauwerk 2008
- Querschnitt 6,2m x 2,2m
- kein Nachschnitt der Auflockerungszone
- Messungen: Setzungen, Druckspannungen und Temperaturen
- Verfüllung (SB A1): 25.03. bis 27.03.08
- 3 Verfüllabschnitte (inkl. unteres Widerlager)

ANWENDUNGEN BS 4 (TM) – THERMISCHE AUSLEGUNG

Vergleich zwischen Messung und Berechnung



Berechnungsergebnisse in den Messhorizonten

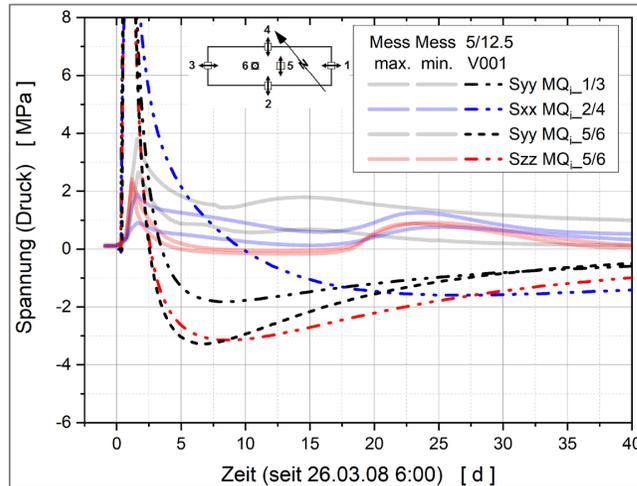


Blindschacht 4 (BS 4)

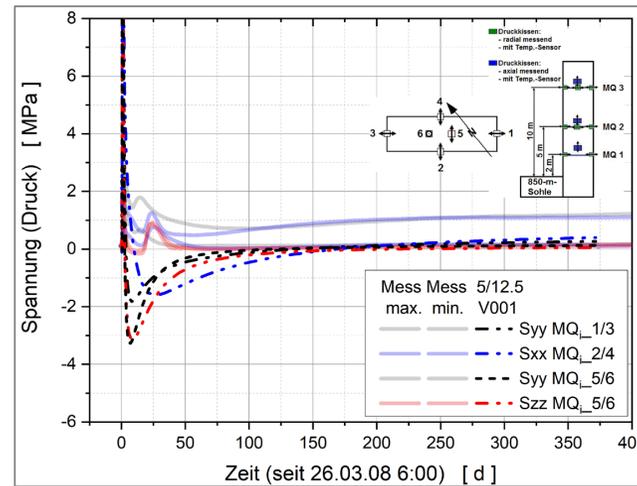
- Gute Approximationsgüte des thermisch besonders aktiven Zeitbereichs der Erhärtung
- Vereinfachter thermischer Energietransport in Luft
- Nachreaktionsphase bleibt unberücksichtigt

ANWENDUNGEN BS 4 (TM) – MECHANISCHE AUSLEGUNG

Vergleich zwischen Messung und Berechnung



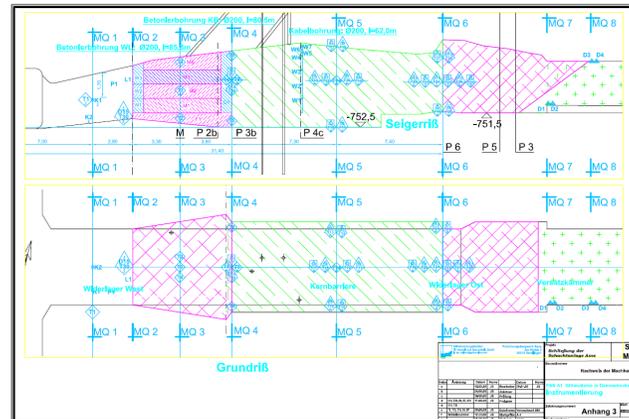
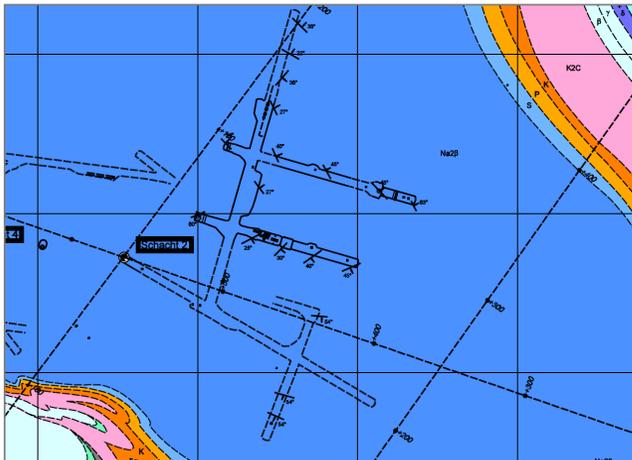
Berechnungsergebnisse in den Messhorizonten



Blindschacht 4 (BS 4)

- Keine Messdaten im Zugbereich verfügbar bzw. möglich (mglw. bis -1 ... -1,5 MPa)
- Nachreaktionsphase bleibt unberücksichtigt
- Überschätzung vorzugsweise zum Zeitpunkt maximaler Druckentwicklung um Faktor 2
- Zugspannungsüberschätzung innerhalb des Festigkeitsbereichs

ANWENDUNGEN PSB-A1 (TM) - KONFIGURATION



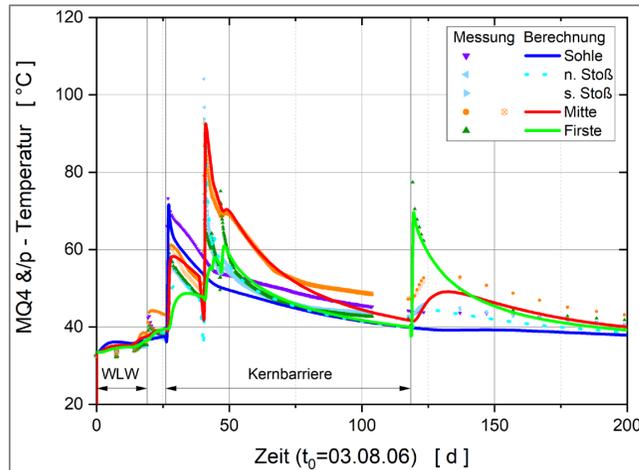
Pilotströmungsbarriere PSB-A1

- Auffahrung 1988 – 1992, 950-m-Sohle
- ausgerundeter Streckenquerschnitt ca. 5,2m x 3,75m
- anstehendes Gebirge Hauptsalz
- Versuchsbauwerk 2006
- Nachschnitt 6,2m x 5,6m
- Messungen von Konvergenzen, Druckspannungen, Temperaturen und Hydrofrac (im Gebirge)
- Widerlager Ost: Sorelbeton (SB) 29.6 A2, 25.08.-21.09.04
Widerlager West: SB A1, 03.08.-22.08.06
Kernbarriere: SB A1, 29.08. bis 18.09.06 und am 29.11.06

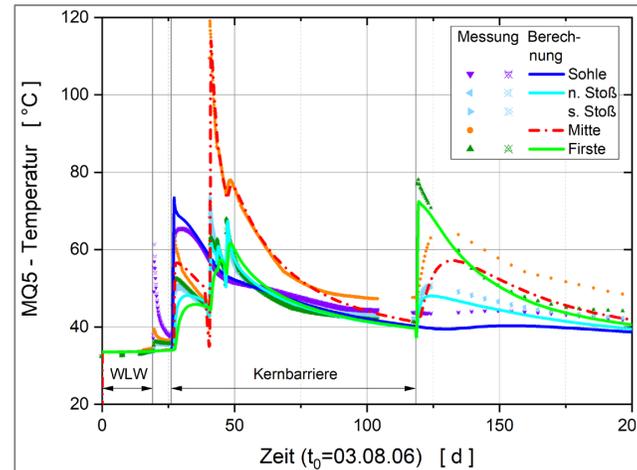
Quelle:
[HEY 2015]

ANWENDUNGEN PSB-A1 (TM) – THERMISCHE AUSLEGUNG

Vergleich zwischen Messung und Berechnung – MQ4



Vergleich zwischen Messung und Berechnung – MQ5

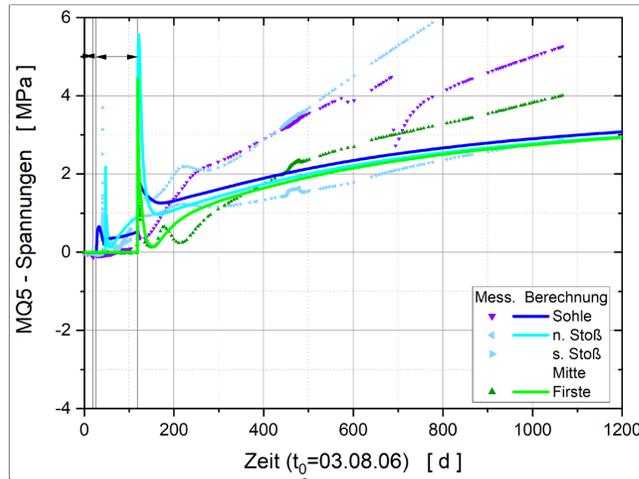


Pilotströmungsbarriere PSB-A1

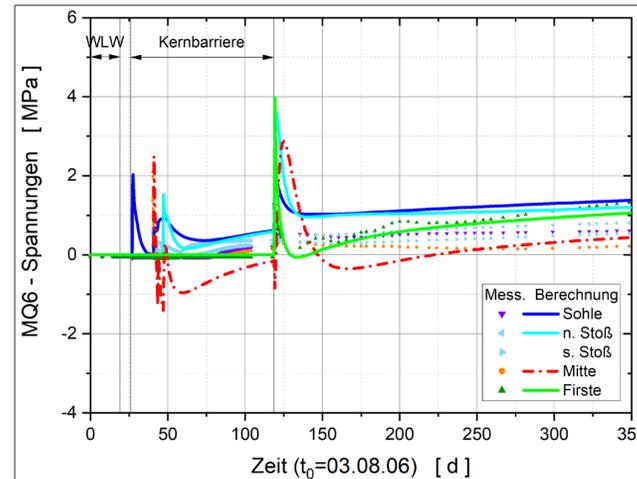
- Varianz in Sensorposition und Verfüllhistorie
- Gute Approximationsgüte des thermisch besonders aktiven Zeitbereichs des Hydratationsprozesses
- Vereinfachter thermischer Energietransport in Luft
- Nachreaktionsphase bleibt unberücksichtigt

ANWENDUNGEN PSB-A1 (TM) – MECHANISCHE AUSLEGUNG

Vergleich zwischen Messung und Berechnung – MQ5



Vergleich zwischen Messung und Berechnung – MQ6

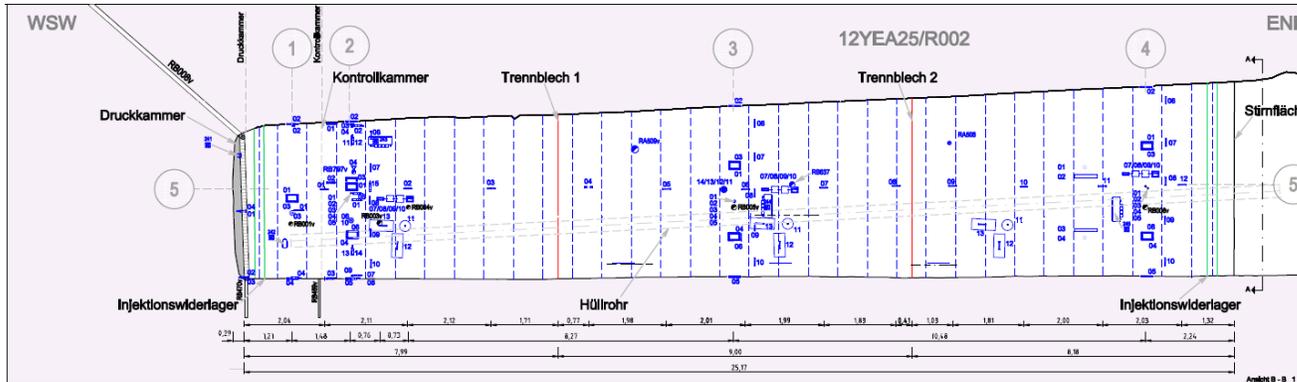
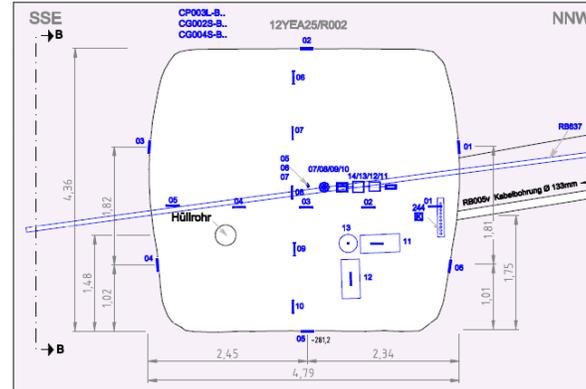


Pilotströmungsbarriere PSB-A1

- Keine Messdaten im Zugbereich (mglw. bis -1 MPa)
- Nachreaktionsphase bleibt unberücksichtigt
- Überschätzung vorzugsweise zum Zeitpunkt maximaler Druckentwicklung um Faktor 2
- Zugspannungsüberschätzung innerhalb des Festigkeitsbereichs

ANWENDUNGEN IN-SITU-VERSUCH M2 (TM) - KONFIGURATION

In situ-Versuch Abdichtbauwerk im Steinsalz aus Salzbeton M2



- Auffahrung Q1/2010
- ca. 415 m Teufe
- Rechteckiger Streckenquerschnitt (ca. 4,3m x 3,3m)
- anstehendes Gebirge Hauptsalz
- Versuchsbauwerk Q4/2010
- Nachschnitt auf ausgerundeten Streckenquerschnitt ca. 4,8m x 3,7 ... 4,9m
- Messungen u.a. von Konvergenzen, Druckspannungen, Betondehnungen, Temperaturen, Porendrücken, ... sowie Hydrofrac- und Perm.-Messungen (im Gebirge, Baukörper und Kontaktzone)
- Betonage „frisch-in-frisch“

ANWENDUNGEN IN-SITU-VERSUCH M2 (TM) - MODELLIERUNG

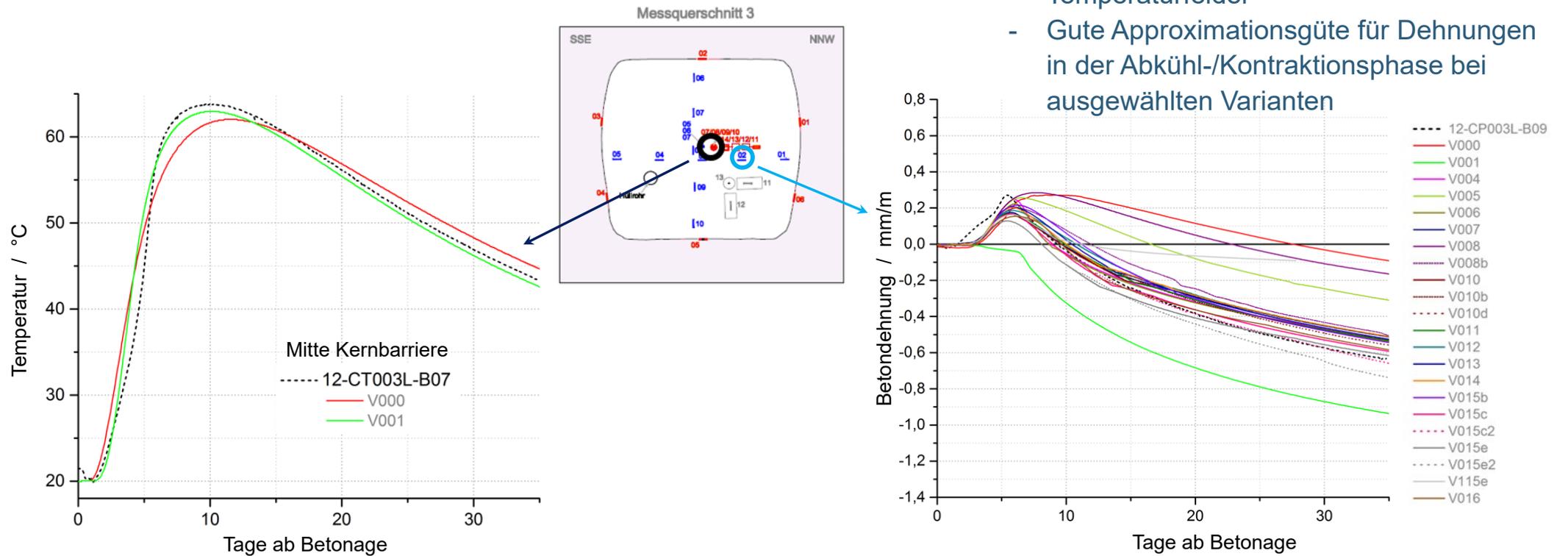


BUNDESGESELLSCHAFT
FÜR ENDLAGERUNG

BGE TECHNOLOGY GmbH

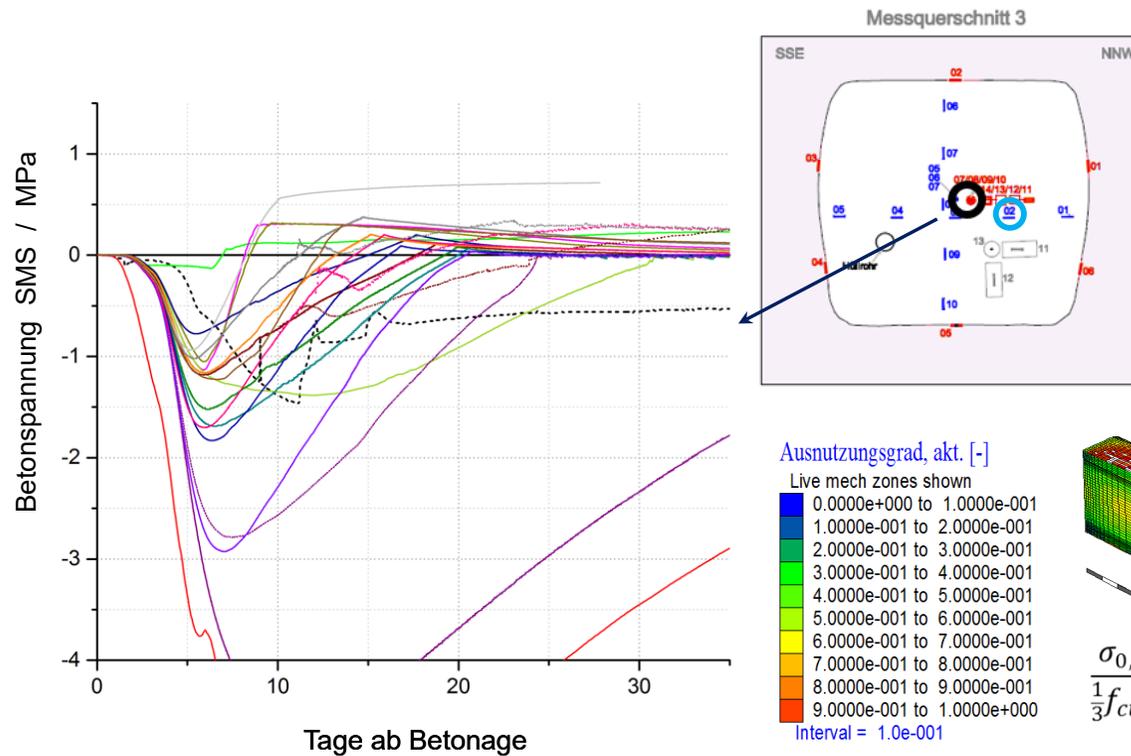
In situ-Versuch Abdichtbauwerk im Steinsalz aus Salzbeton M2

- Gute Approximationsgüte für Temperaturfelder
- Gute Approximationsgüte für Dehnungen in der Abkühl-/Kontraktionsphase bei ausgewählten Varianten



ANWENDUNGEN IN-SITU-VERSUCH M2 (TM) - MODELLIERUNG

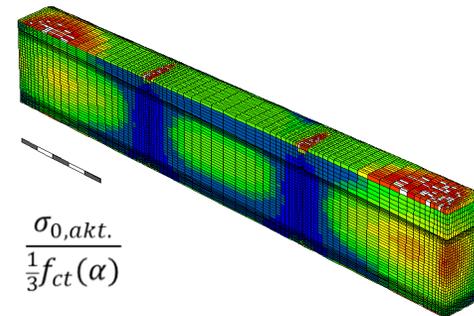
In situ-Versuch Abdichtbauwerk im Steinsalz aus Salzbeton M2



Ausnutzungsgrad, akt. [-]
Live mech zones shown

0.0000e+000 to 1.0000e-001
1.0000e-001 to 2.0000e-001
2.0000e-001 to 3.0000e-001
3.0000e-001 to 4.0000e-001
4.0000e-001 to 5.0000e-001
5.0000e-001 to 6.0000e-001
6.0000e-001 to 7.0000e-001
7.0000e-001 to 8.0000e-001
8.0000e-001 to 9.0000e-001
9.0000e-001 to 1.0000e+000

Interval = 1.0e-001



- Spannungsaufbau und Spannungsverteilung nach Rissbildungen nur eingeschränkt abbildbar (älterer Stand des Stoffmodells, Kontinuumsmechanik)
- Potenzielle Rissgefährdung kann zwar bewertet werden, aber
- realitätsnahe Abbildung würde Rissmodellierung erfordern (Initialisierung, Wachstum, ...)

ZUSAMMENFASSUNG

05

ZUSAMMENFASSUNG

▪ Thermisches Verhalten

- Thermisches Stoffmodell bildet den einphasigen Prozess gut ab
- Bestimmung der thermischen Materialparameter sowohl für Sorelbetone (29.6 A2 und SB A1) als auch Salzbetone erfolgreich
- Anwendung auf in-situ Beispiele aus Sorelbeton A1 und 29.6 A2 sowie aus Salzbeton M2
- Limitierte Eigenschaften des Konvektionsmodells (nur relevant für Energietransport während Ruhezeiten)
- Erfolgreiche Verifikation des in-situ gemessenen Verhaltens

ZUSAMMENFASSUNG

▪ Mechanisches Verhalten

- Anwendung eines verbesserten Ansatzes mit gemeinsamen Datensatz auf in-situ Bauwerke aus SB A1
- Langzeitverhalten gut prognostizierbar
- Überschätzung der Maximalwerte im Zug- und Druckverhalten temporär um ca. das Zwei- bis Vierfache
- Verbesserung im Prozessverständnis durch UVERSTOFF (in Anwendungen unberücksichtigt)
- Rissbildung / Lokalisierung von plastischen Verformungen nur eingeschränkt abbildbar

ZUSAMMENFASSUNG

- Phasenwandlung in Nachreaktion: aus Nachweissicht ist fehlende Berücksichtigung eine konservative Auslegung (Berücksichtigung ist möglich)
- Verbesserungen
 - 2-Phasen-Modell ist implementierbar
 - Weitergehende mechanische Verbesserungen im viskosen Ansatz
 - Prozess der Eigenverdichtung schließt möglw. Lücke zwischen Labor und in-situ

BETEILIGUNGEN



BGE-TEC	C. Lerch, M. Herklotz, A. Hussein, N. Müller-Hoeppe, M. Polster
BGE ASE	M. Heydorn, A. Weis
BGE EMO	A. Carstensen, T. Schröpfer

Vielen Dank

... an BMWi und PTKA für die Förderung und Unterstützung des F&E-Vorhabens UVERSTOFF (02 E 11678).

... an die langjährige Unterstützung der BGE-ASE und die vorangegangenen Betreiber ASSE-GmbH und Helmholtz-Zentrum München

... an die Abteilung BGE-EMO und deren Vorläufern



**VIELEN DANK FÜR IHRE
AUFMERKSAMKEIT**

LITERATUR

- [PAS 15] Paschke, I. & Freyer, D.: Das rezepturbedingte Abbindeverhalten des Magnesiabaustoffs (Phasenbildung). In: [PTK 15] PTKA [Hrsg.]: Endlagerforschung - Fachgespräch "Verschlussysteme – In-situ-Bauwerke aus Magnesiabaustoff und dessen chemisch-mechanischen Eigenschaften im Hinblick auf HAW-Endlager“, Freiberg, 28.-29.04.2015.
https://www.ptka.kit.edu/ptka-alt/downloads/ptka-wte-e/FG_Verschluss_2015_Vortraege_Web-Version.pdf
- [KON 69] Kondo, R. & Ueda, S.: Kinetics and Mechanism of the Hydration of Cements. In: Kyōkai, S.: Proceedings of the Fifth International Symposium on the Chemistry of Cement, Tokyo, 1968 - Part II Hydration of Cements (Vol. 2). Cement Association of Japan, 1969
- [FRE 77] Freiesleben Hansen, P. & Pedersen, E. J.: Måleinstrument til kontrol af betons hærkning. Nordisk Betong, Nr. 1, 1977.
- [ENG 03] Engelhardt, H.-J. et al.: A Constitutive Law of Salt Concrete used for Closure of an LILW-Repository. In: ASME [Hrsg.]: ICEM '03: Conference Proceedings of the International Conference on Radioactive Waste Management and Environmental Remediation. 21.–25.09.2003, Oxford, England.
- [HEY 15] Heydorn, M. et al.: Schachtanlage Asse II - Anwendungsversuch Pilot-strömungsbarriere PSB A1. In: [PTK 15] s. o.
- [MÜL 21] Müller-Hoeppe, N. & Lerch, C.: UVERSTOFF - Untersuchungen zur Vervollständigung von Stoffmodellen für Salz- oder Sorelbeton sowie spezieller low-ph und hochdichter bzw. hochfester Betone zum rechnerischen Nachweis der Rissbeschränkung für Bauwerke. BGE TEC 2021-18. Peine: BGE TECHNOLOGY, 2021.
https://www.bge-technology.de/fileadmin/user_upload/FuE_Berichte/2021-Abschlussbericht_UVERSTOFF.pdf



**BUNDESGESELLSCHAFT
FÜR ENDLAGERUNG**



TEC

BGE TECHNOLOGY GmbH

MIRKO POLSTER
Leiter TEC-NU

Zentrale Peine | Eschenstr. 55 | 31224 Peine
T +49 5171 43-1519
E mirko.polster@bge.de

www.bge.de
www.einblicke.de



@die_BGE

www.bge-technology.de

2.17

J. Wolf, M. Niemeyer und J. Kindlein: **Bedeutung der geotechnischen Barrieren im Safety Case: Sicherheitskonzepte und die Darstellung des sicheren Einschlusses im einschlusswirksamen Gebirgsbereich**



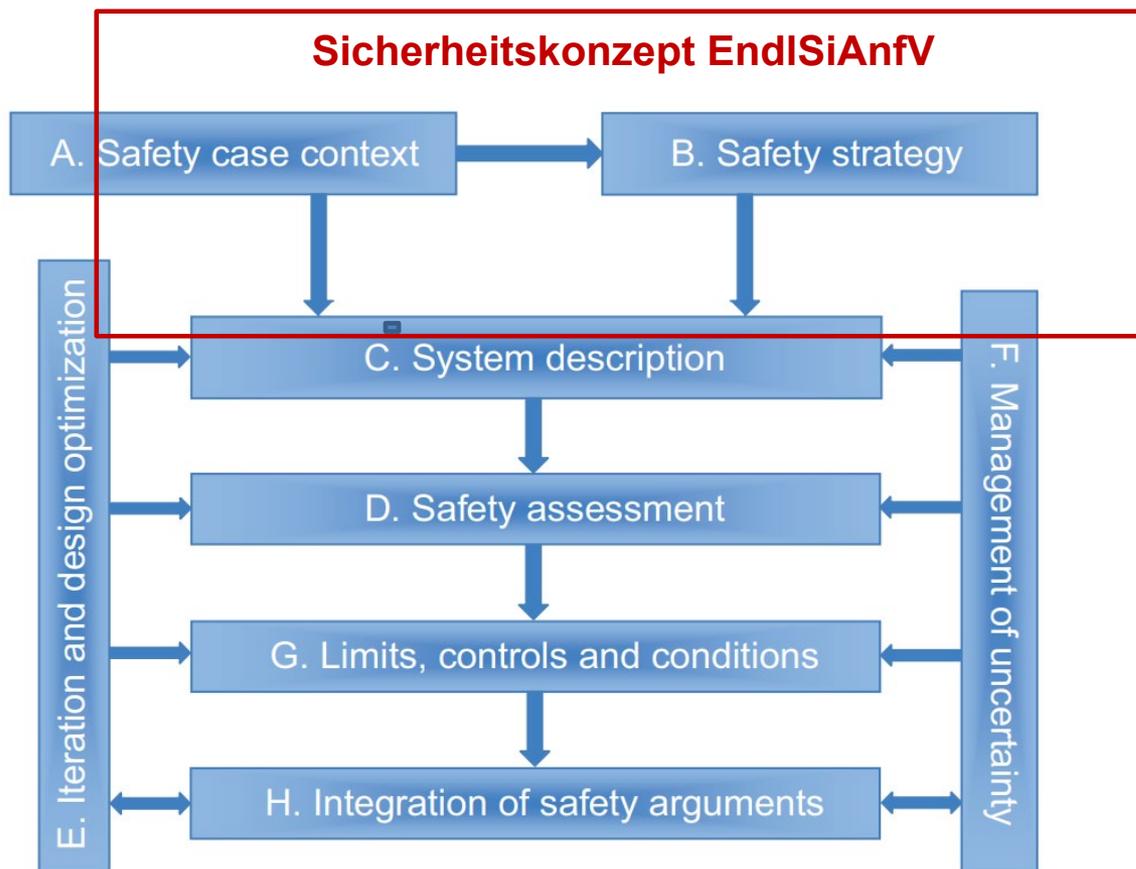
Sicherheitskonzepte und die Darstellung des sicheren Einschlusses (ewG) – Bedeutung der geotechnischen Barrieren im Safety Case

Jens Wolf, GRS

07.09.2023

AKB-Workshop: Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar

Elemente des Safety Case



Quelle: IAEA SSG-23

Inhalt

Sicherheitskonzept

- Sicherheitsstrategie
 - Wie will ich die Sicherheit erreichen und prüfen?
 - Welche Barrieren sind wichtig? Zuweisung von Sicherheitsfunktionen
- Systembeschreibung
 - Beschreibung der natürlichen Gegebenheiten
 - Beschreibung der technischen und geotechnischen Barrieren
- Umgang mit Ungewissheiten
 - Zukünftige Entwicklung des Endlagersystems
 - Robustheit

- Wichtiges Element des Optimierungsprozesses

Wie will ich die Sicherheit erreichen und prüfen?

Konzentration und **sicherer Einschluss** der radioaktiven Abfälle in einem einschlusswirksamen Gebirgsbereich

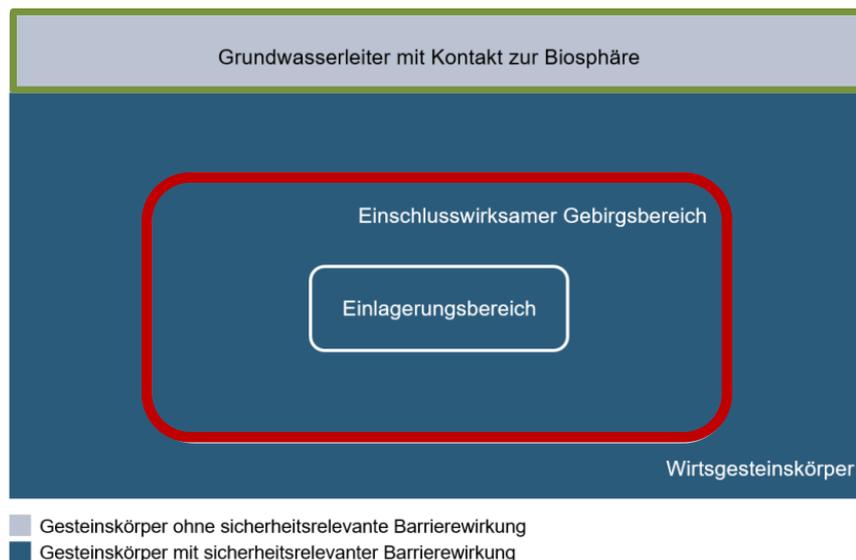
Für die zu erwartenden Entwicklungen ist zu prüfen und darzustellen, dass im Bewertungszeitraum

1. insgesamt höchstens ein Anteil von 10^{-4}
2. jährlich höchstens ein Anteil von 10^{-9}

sowohl der Masse als auch der Anzahl der Atome aller ursprünglich eingelagerten Radionuklide aus dem Bereich der wesentlichen Barrieren ausgetragen wird.

1. für die zu erwartenden Entwicklungen die abgeschätzte zusätzliche effektive Dosis für Einzelpersonen der Bevölkerung höchstens im Bereich von 10 Mikrosievert pro Kalenderjahr liegt und

2. für die abweichenden Entwicklungen die abgeschätzte zusätzliche effektive Dosis für Einzelpersonen der Bevölkerung 100 Mikrosievert pro Kalenderjahr nicht überschreitet.



Quelle: AKEnd / BGE / Kommissionsbericht

Sicherheitskonzept § 10 EndlSiAnfV (I)

- Ziel: Konzentration und sicherer Einschluss der radioaktiven Abfälle nach § 4
 - a. Errichtung,
 - b. Betrieb und Stilllegung sowie
 - c. im Bewertungszeitraum
- Basis für die Erstellung des Sicherheitskonzeptes sind die zu erwartenden Entwicklungen des Endlagersystems im Bewertungszeitraum; die abweichenden Entwicklungen sind einzubeziehen
- Im Sicherheitskonzept sind die Ergebnisse der umfassenden vsU nach § 18 Absatz 1 Satz 2 des Standortauswahlgesetzes zu berücksichtigen; insbesondere sind Änderungen gegenüber dem in der umfassenden vSU zu Grunde gelegten vorläufigen Sicherheitskonzept auszuweisen und zu begründen
- Es ist darzustellen, dass die Optimierung des Sicherheitskonzeptes nach § 12 Absatz 2 abgeschlossen ist

Sicherheitskonzept § 10 EndlSiAnfV (II)

- Das Sicherheitskonzept enthält
 - **Darstellung aller vorgesehenen Barrieren des Endlagersystems**, insbesondere der wesentlichen Barrieren nach § 4 Absatz 3, ihrer jeweiligen Sicherheitsfunktionen und ihres Zusammenwirkens, enthalten.
 - **Darstellung eines Verschlusskonzeptes zur Abdichtung von Hohlräumen**, die mit radioaktiven Abfällen beladen worden sind.
 - Es ist darzulegen, dass die Sicherheitsfunktionen des Endlagersystems und seiner Barrieren **gegenüber inneren und äußeren Einflüssen und Störungen unempfindlich sind und dass das Verhalten der Barrieren gut prognostizierbar** ist.
 - Ablaufplan für die Errichtung, den Betrieb und die Stilllegung des Endlagers, der darlegt, wie die Sicherheit des Endlagers nach § 17 sichergestellt werden kann und wie die radioaktiven Abfälle in einem sicheren Zustand gehalten werden können,
 - Darstellung der Maßnahmen, mit denen die Rückholbarkeit gewährleistet wird
 - Darstellung der Vorkehrungen, die zur Ermöglichung einer Bergung getroffen werden.
- Im Sicherheitskonzept zu berücksichtigen sind Maßnahmen, die bis zum Abschluss der Stilllegung erforderlich sind
 - zur Gewährleistung des erforderlichen Schutzes des Endlagers vor Störmaßnahmen und sonstigen Einwirkungen Dritter und
 - zur Überwachung von Kernmaterial.

Wesentliche und weitere Barrieren

- wesentliche Barrieren: die Barrieren, auf denen der sichere Einschluss der radioaktiven Abfälle beruht
 - ewG § 5 EndlSiAnfV
 - technische und geotechnische Barrieren (§6 EndlSiAnfV nur für Kristallin)

- weitere Barrieren: die Barrieren, die zusätzlich zu den wesentlichen Barrieren und im Zusammenwirken mit ihnen eine Ausbreitung von Radionukliden be- oder verhindern

§ 5: Integrität und Robustheit des ewG als wesentliche Barriere

- Es ist zu prüfen und darzustellen, dass die für den sicheren Einschluss der radioaktiven Abfälle relevanten Eigenschaften der technischen und geotechnischen Barrieren mindestens in dem Zeitraum erhalten bleiben, in dem diese Barrieren nach dem Sicherheitskonzept erforderlich sind.
- Die für die Langzeitsicherheit erforderlichen Eigenschaften von technischen oder geotechnischen Barrieren sind im Sicherheitskonzept zu spezifizieren. Es ist zu prüfen und darzustellen, dass die Herstellung und Errichtung der Barrieren nach diesen Spezifikationen in der erforderlichen Anzahl qualitätsgesichert möglich sind.
- Die vorgesehene Qualitätssicherung muss dem Stand von Wissenschaft und Technik entsprechen. Die Herstellung, die Errichtung und die Funktion der Barrieren müssen erfolgreich erprobt sein, soweit ihre Robustheit nicht anderweitig nachgewiesen werden kann und keine Sicherheitsreserven in einem Umfang bestehen, die den Verzicht auf eine Erprobung erlauben.

Wie will ich die Sicherheit erreichen und prüfen?

Konzentration und **sicherer Einschluss** der radioaktiven Abfälle in einem einschlusswirksamen Gebirgsbereich

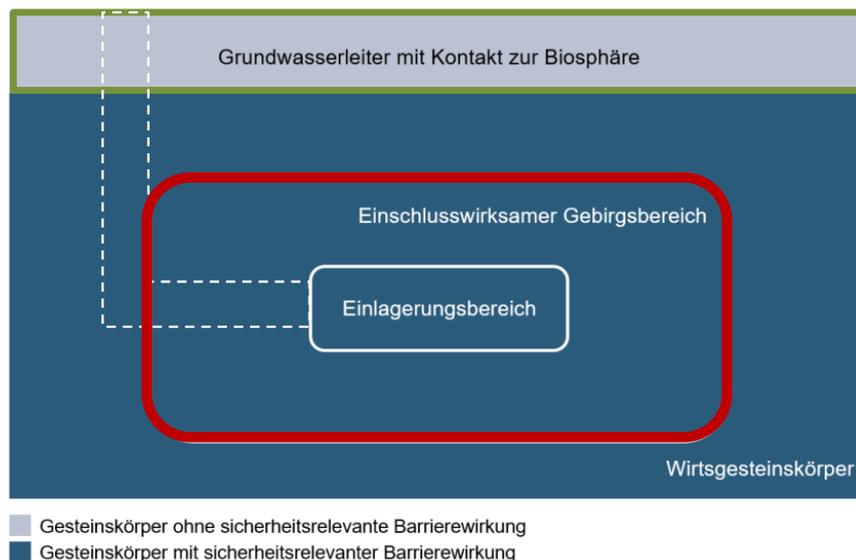
Für die zu erwartenden Entwicklungen ist zu prüfen und darzustellen, dass im Bewertungszeitraum

1. insgesamt höchstens ein Anteil von 10^{-4}
2. jährlich höchstens ein Anteil von 10^{-9}

sowohl der Masse als auch der Anzahl der Atome aller ursprünglich eingelagerten Radionuklide aus dem Bereich der wesentlichen Barrieren ausgetragen wird.

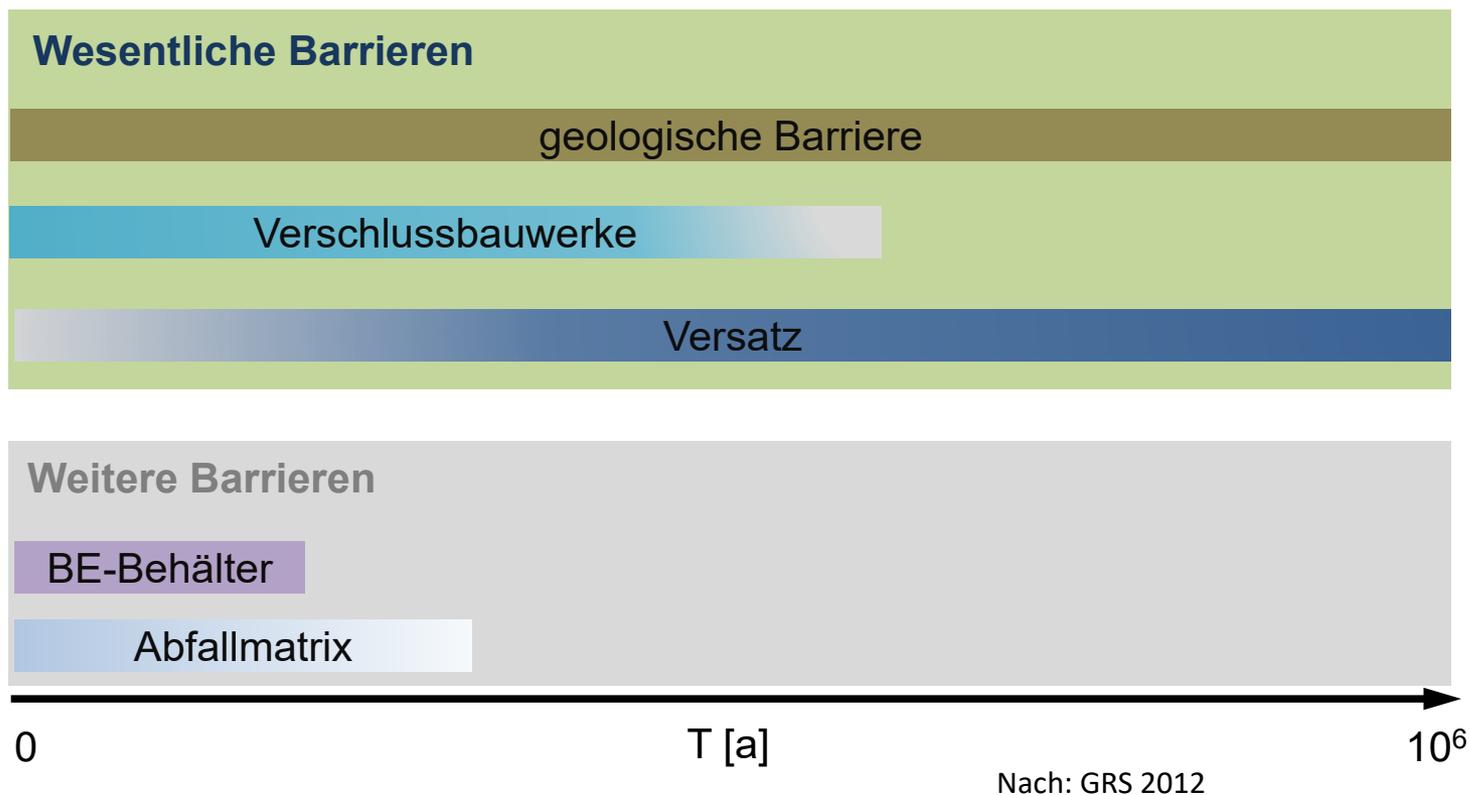
1. für die zu erwartenden Entwicklungen die abgeschätzte zusätzliche effektive Dosis für Einzelpersonen der Bevölkerung höchstens im Bereich von 10 Mikrosievert pro Kalenderjahr liegt und

2. für die abweichenden Entwicklungen die abgeschätzte zusätzliche effektive Dosis für Einzelpersonen der Bevölkerung 100 Mikrosievert pro Kalenderjahr nicht überschreitet.



Quelle: AKEnd / BGE / Kommissionsbericht

Zeitliche Wirkung der verschiedenen Barrieren im Endlagersystem

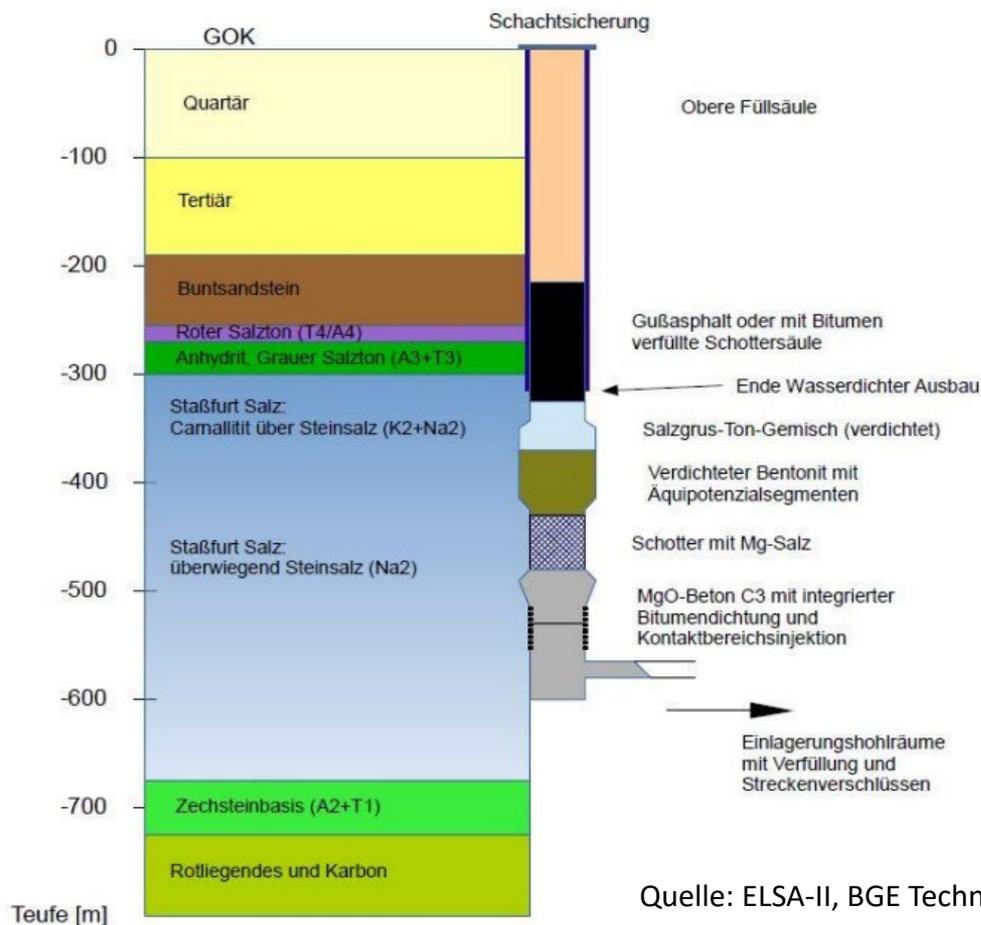


Wesentliche und weitere Barrieren ewG-Konzept

- wesentliche Barrieren: die Barrieren, auf denen der sichere Einschluss der radioaktiven Abfälle beruht
 - ewG §5 EndlSiAnfV
 - ewG
 - Verschlussbauwerke
 - Versatz
 - technische und geotechnische Barrieren (§6 EndlSiAnfV nur für Kristallin)

- weitere Barrieren: die Barrieren, die zusätzlich zu den wesentlichen Barrieren und im Zusammenwirken mit ihnen eine Ausbreitung von Radionukliden be- oder verhindern

Beispiel: Wesentliche Barriere Schachtverschluss



Quelle: ELSA-II, BGE Technology

Ungewissheiten

- Beschreibung des Anfangszustandes des Endlagersystems
 - „Anfangszustand“ beginnt mit Auffahrung
 - Begrenzte Kenntnis des Untergrundes

- Entwicklung des Endlagersystems bis 10^6 Jahre
- **Kategorisierung** nach §3 EndlSiAnfV erforderlich:
 - plausibel
 - zu erwartende Entwicklungen
 - abweichende Entwicklungen
 - zukünftige menschliche Aktivitäten (nicht prognostizierbar → stilisiert)
 - nach menschlichem Ermessen auszuschließen
 - hypothetische Entwicklungen (~ what-if)

Hab ich an alles gedacht?

Hab ich an alles gedacht?

- Einfache Frage, komplexe (theoretisch unmögliche) Antwort
- Ermittlung der Entwicklungen nach Stand von Wissenschaft und Technik anhand technischer Richtlinien und Regelwerke
- Durch ein systematisches Vorgehen nach dem internationalen Stand von Wissenschaft und Technik, beispielsweise unter Einbeziehung so genannter **FEP-Kataloge** („Features, Events and Processes“) und der systematischen Betrachtung von **Sicherheitsfunktionen** soll sichergestellt werden, dass die identifizierten möglichen Entwicklungen die tatsächliche zukünftige Entwicklung des Endlagers abdecken. Dies bedeutet jedoch nicht, dass der Anspruch erhoben wird, die tatsächliche Entwicklung exakt zu prognostizieren. Daher sind mindestens eine zu erwartende Entwicklung (als Grundlage für die Planung des Endlagers) sowie abweichende Entwicklungen aufzuführen.

Was bedeutet „nach menschlichem Ermessen auszuschließen“?

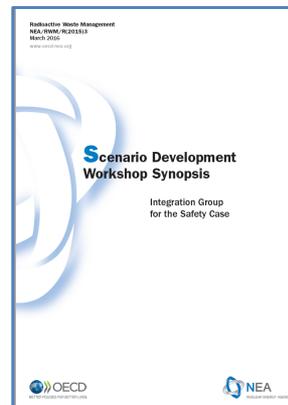
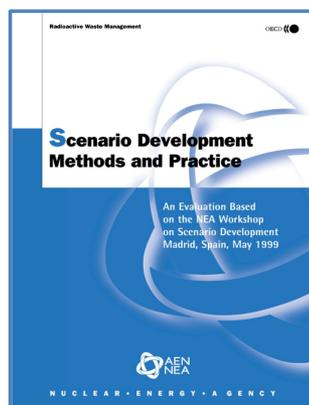
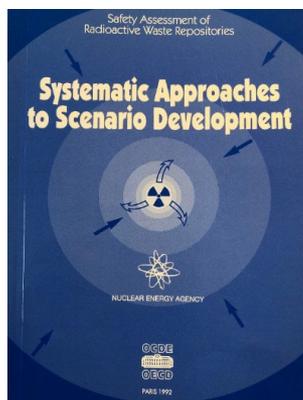
- Einfache Frage, komplexe (theoretisch unmögliche) Antwort

Definition EndlSiAnfV § 3	Kategorisierung von Entwicklungen	Entscheidungshilfen gemäß	
		Begründung 19/19291	BMU (2010)
<p><i>Entwicklungen, die sicher oder in der Regel eintreten werden, insbesondere hinsichtlich der geologischen und klimatischen Situation, der geologischen, technischen und geotechnischen Barrieren sowie der einzulagernden Abfälle</i></p>	<p>Tritt die Entwicklung sicher oder in der Regel ein?</p> <p>ja, wenn → zu erwartende Entwicklung</p> <p>sonst</p>	<p>geschlussfolgert werden kann, dass sie innerhalb des Bewertungszeitraumes mit hoher Wahrscheinlichkeit einmal oder wiederholt eintreten werden und das Endlagersystem oder seine geologische Umgebung betreffen</p>	<p>a) am Standort eingetreten oder an vergleichbaren Standorten beobachtet wurde b) bei technischen Komponenten die prognostizierte Entwicklung ihrer Eigenschaften zugrunde gelegt wird</p>
<p><i>Entwicklungen, die nicht zu erwarten sind, aber hinsichtlich der geologischen und klimatischen Situation, der technischen und geotechnischen Barrieren sowie der einzulagernden Abfälle eintreten können</i></p>	<p>Kann die Entwicklung eintreten?</p> <p>ja, wenn → abweichende Entwicklung</p> <p>sonst</p>	<p>Verweis auf BMU (2010)</p>	<p>a) unter ungünstigen Annahmen oder an vergleichbaren Standorten selten aufgetreten b) bei technischen Endlagerkomponenten abweichende ungünstige Eigenschaften unterstellt werden</p>
	<p>keine systematische Ableitung nach § 3 EndlSiAnfV</p>		

„zeE und aE sollen alle zukünftigen Entwicklungen des Endlagersystems abdecken, die innerhalb der Grenzen der praktischen Vernunft möglich erscheinen“.
(Begründungstext EndlSiAnfV)

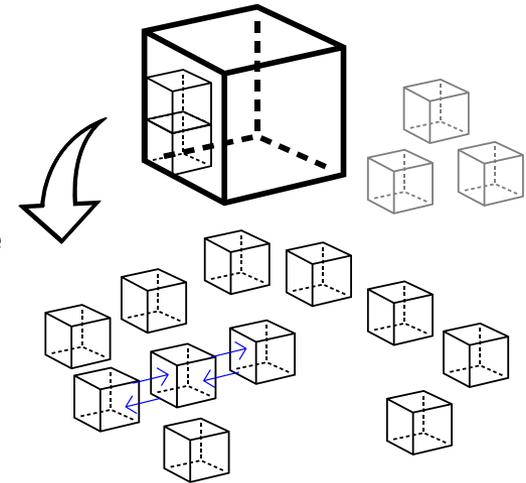
Hab ich an alles gedacht?

- Einfache Frage, komplexe (theoretisch unmögliche) Antwort
- Ermittlung der Entwicklungen nach Stand von Wissenschaft und Technik anhand technischer Richtlinien und Regelwerke
 - auf Basis von FEP
 - Darstellung einer umfassenden Analyse nach Stand von WuT
 - Hilfe bei der Ableitung von Entwicklungen
 - Sicherheitsfunktionen



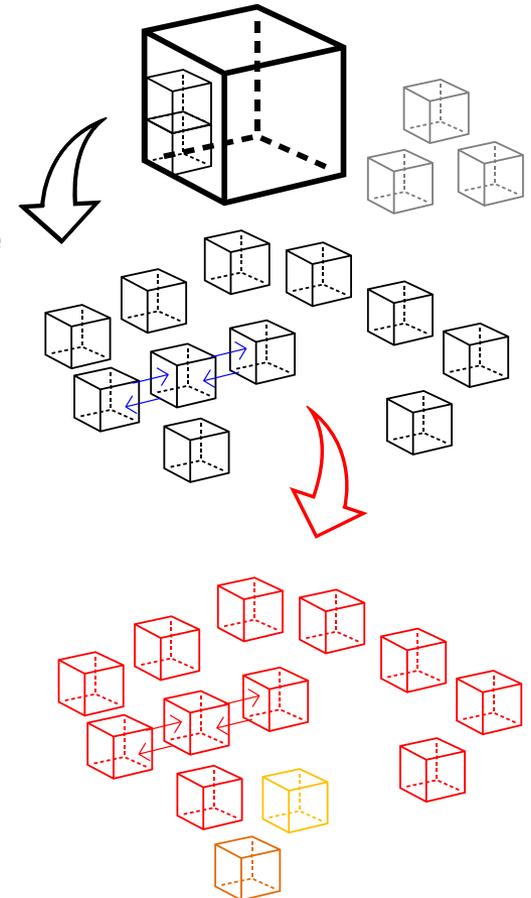
Vorgehensweise Ableitung von Entwicklungen

- Schritt 1: **Untergliederung des Endlagersystems**
 - Identifizierung der Merkmale, Ereignisse und Prozesse
 - Bestimmung der Eintrittserwartung
 - Screening
 - **Abhängigkeiten: Kopplungen**



Vorgehensweise Ableitung von Entwicklungen

- Schritt 1: Untergliederung des Endlagersystems
 - Identifizierung der Merkmale, Ereignisse und Prozesse
 - Bestimmung der Eintrittserwartung
 - Screening
 - Abhängigkeiten: Kopplungen
- Schritt 2: **Bewertung der Entwicklung der FEP**
 - Bewertung der Abhängigkeiten
 - Ungewissheiten führen ggf. zu Verzweigungen

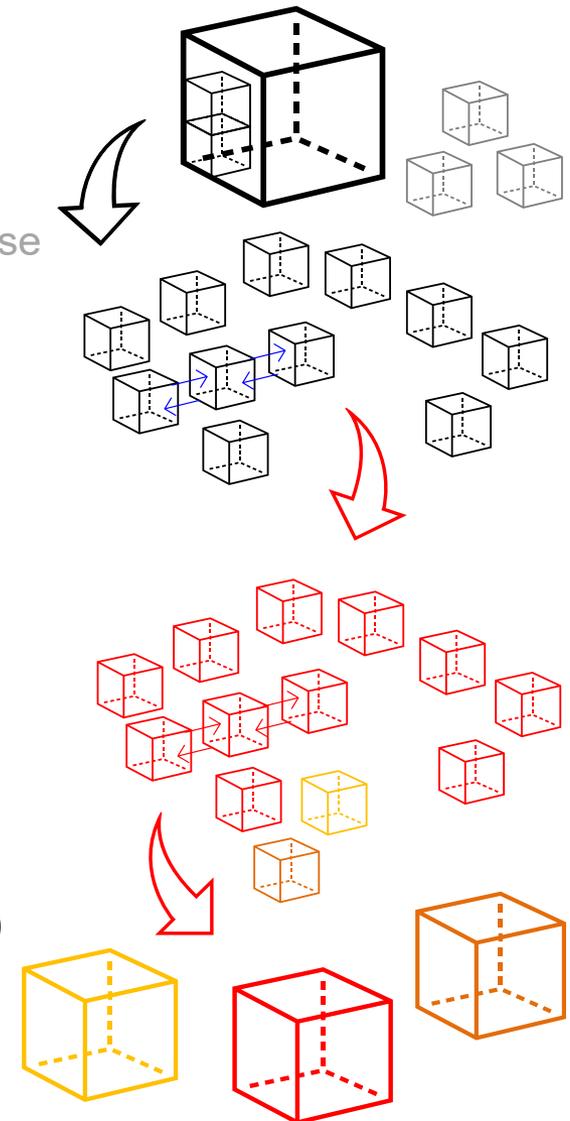


Vorgehensweise Ableitung von Entwicklungen

- Schritt 1: Untergliederung des Endlagersystems
 - Identifizierung der Merkmale, Ereignisse und Prozesse
 - Bestimmung der Eintrittserwartung
 - Screening
 - Abhängigkeiten: Kopplungen

- Schritt 2: Bewertung der Entwicklung der FEP
 - Bewertung der Abhängigkeiten
 - Ungewissheiten führen ggf. zu Verzweigungen

- Schritt 3: **Zusammenführung zu Entwicklungen (Szenarien)**
 - Gruppierung von Entwicklungen (Szenariengruppen)
 - Eintrittserwartung bestimmt Kategorie



Kategorisierung auf der Basis von FEP

Definition EndlSiAnV § 3	FEP-Katalog ERAM	Entscheidungshilfen gemäß	
		Begründung 19/19291	BMU (2010)
<p><i>Entwicklungen, die sicher oder in der Regel eintreten werden, insbesondere hinsichtlich der geologischen und klimatischen Situation, der geologischen, technischen und geotechnischen Barrieren sowie der einzulagernden Abfälle</i></p>	<pre> graph TD Q1[Tritt der Prozess / das Ereignis / das Merkmal sicher oder in der Regel ein?] -- ja, wenn --> A1[zu erwartender FEP] Q1 -- sonst --> Q2[Kann der Prozess / das Ereignis / das Merkmal eintreten?] Q2 -- ja, wenn --> A2[abweichender FEP] Q2 -- sonst --> A3[keine systematische Ableitung nach § 3 EndlSiAnV] </pre>	<p>geschlussfolgert werden kann, dass sie innerhalb des Bewertungszeitraumes mit hoher Wahrscheinlichkeit einmal oder wiederholt eintreten werden und das Endlagersystem oder seine geologische Umgebung betreffen</p>	<p>a) am Standort eingetreten oder an vergleichbaren Standorten beobachtet wurde b) bei technischen Komponenten die prognostizierte Entwicklung ihrer Eigenschaften zugrunde gelegt wird</p>
<p><i>Entwicklungen, die nicht zu erwarten sind, aber hinsichtlich der geologischen und klimatischen Situation, der technischen und geotechnischen Barrieren sowie der einzulagernden Abfälle eintreten können</i></p>	<pre> graph TD Q2[Kann der Prozess / das Ereignis / das Merkmal eintreten?] -- ja, wenn --> A2[abweichender FEP] Q2 -- sonst --> A3[keine systematische Ableitung nach § 3 EndlSiAnV] </pre>	<p>Verweis auf BMU (2010)</p>	<p>a) unter ungünstigen Annahmen oder an vergleichbaren Standorten selten aufgetreten b) bei technischen Endlagerkomponenten abweichende ungünstige Eigenschaften unterstellt werden</p>

Hab ich an alles gedacht?

- Einfache Frage, komplexe (theoretisch unmögliche) Antwort

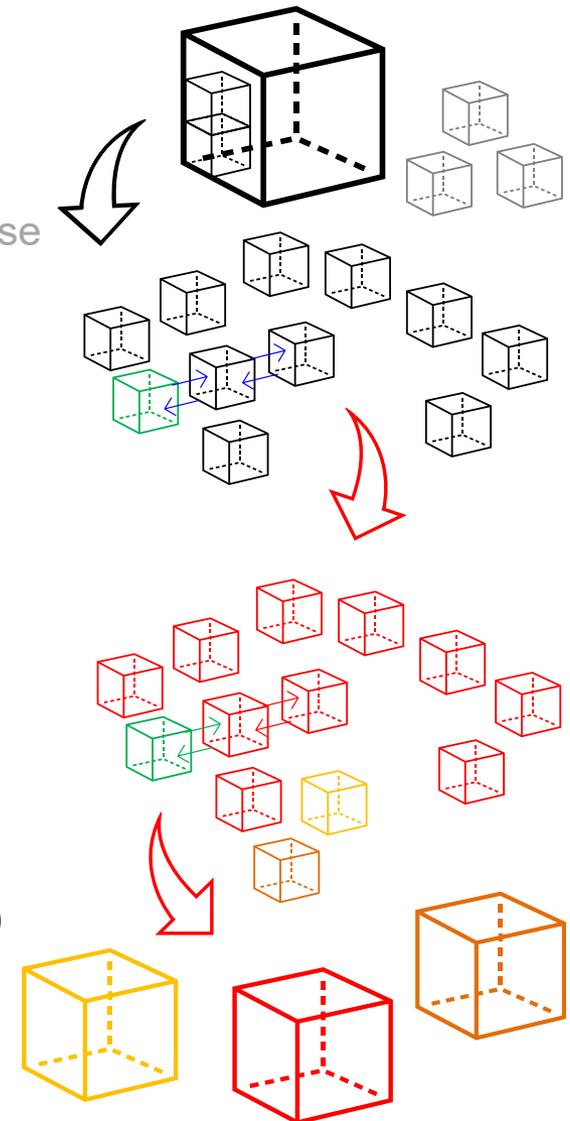
- Ermittlung der Entwicklungen nach Stand von Wissenschaft und Technik anhand technischer Richtlinien und Regelwerke
 - auf Basis von FEP
 - **Sicherheitsfunktionen**

Vorgehensweise Ableitung von Entwicklungen

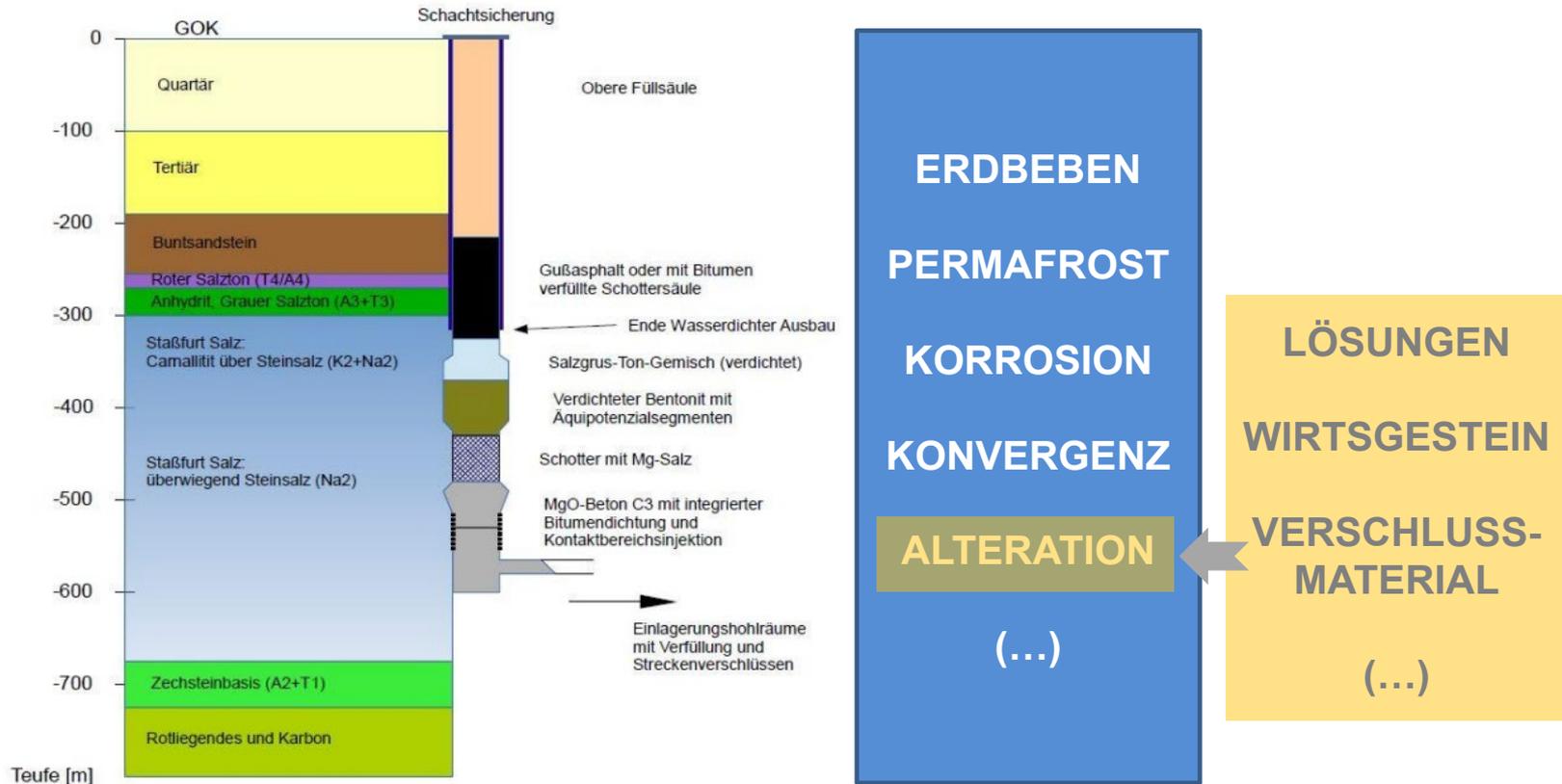
- **Schritt 1: Untergliederung des Endlagersystems**
 - Identifizierung der Merkmale, Ereignisse und Prozesse
 - Bestimmung der Eintrittserwartung
 - Screening
 - Abhängigkeiten: Kopplungen

- **Schritt 2: Bewertung der Entwicklung der FEP**
 - Bewertung der Abhängigkeiten
 - Ungewissheiten führen ggf. zu Verzweigungen
 - Fokussierung auf **wesentliche Barrieren**

- **Schritt 3: Zusammenführung zu Entwicklungen (Szenarien)**
 - Gruppierung von Entwicklungen (Szenariengruppen)
 - Eintrittserwartung bestimmt Kategorie

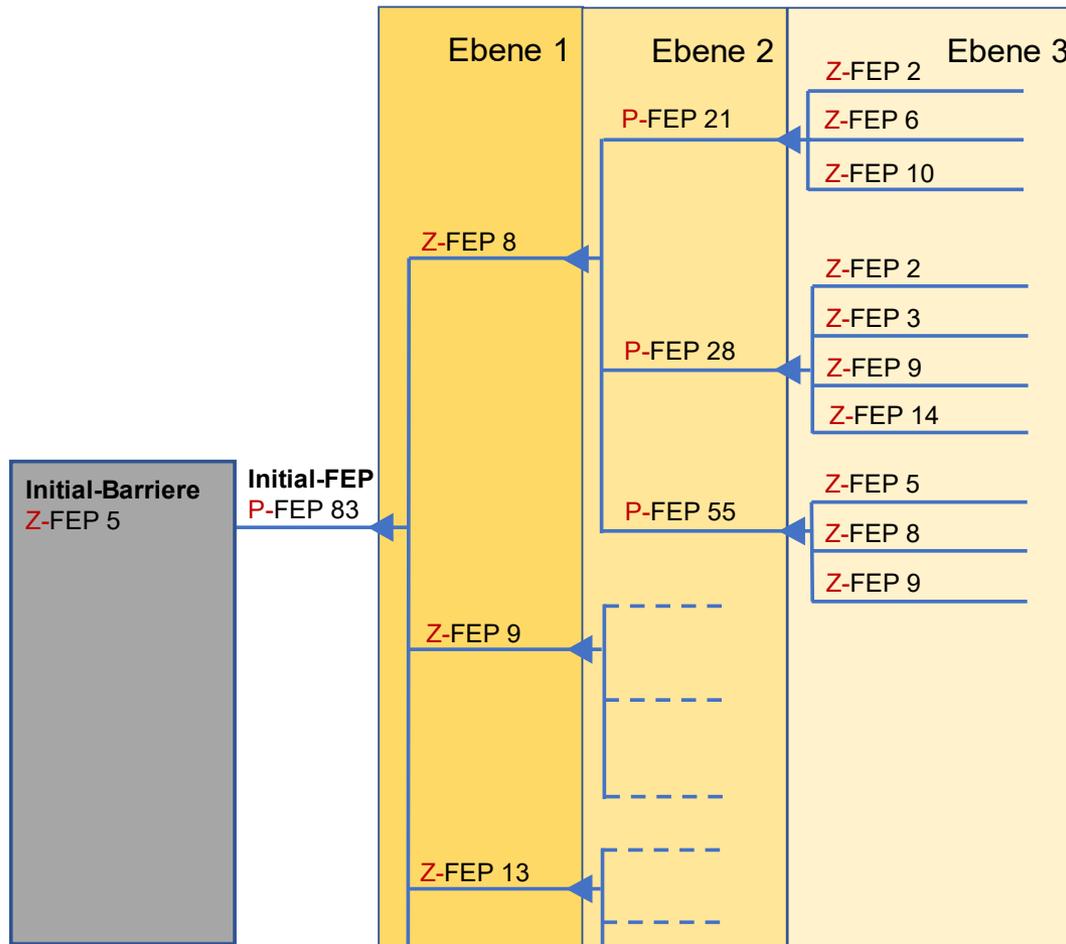


Beispiel Entwicklung Schachtverschluss



Quelle: ELSA-II, BGE Technology

Abhängigkeitsbäume



Beeinflussende FEP für Verschlussbauwerke

FEP mit entsprechender potenzieller Einwirkung auf Schacht- oder Streckenverschlüsse sind:

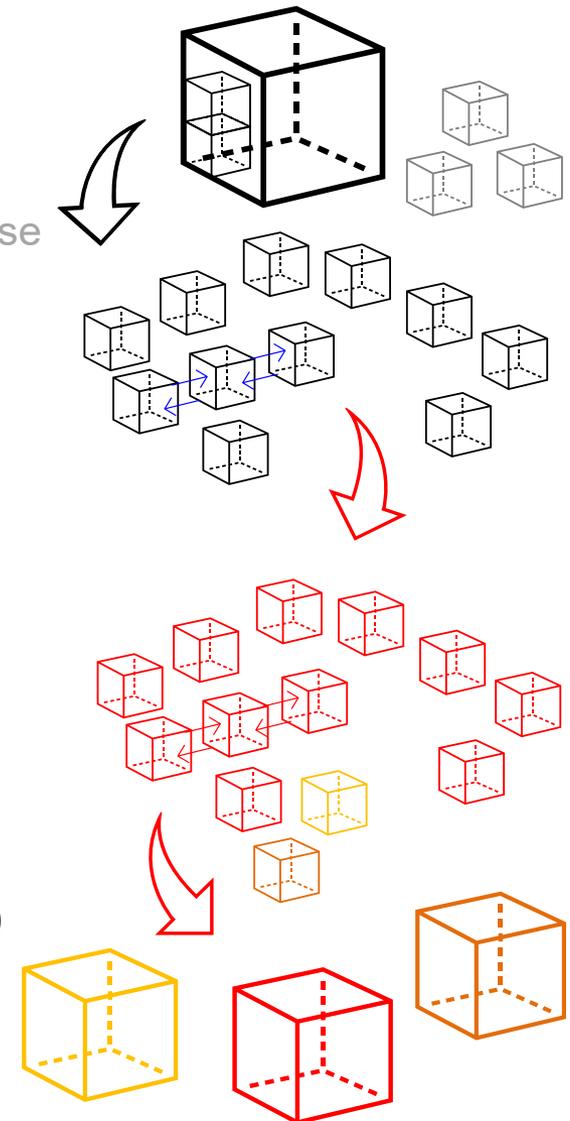
- Erdbeben
- Chemische und mikrobielle Alteration (Korrosions- oder Umwandlungsprozesse in Abhängigkeit des verwendeten Materials)
- Konvergenz und Spannungsänderungen
- Thermische Expansion oder Kontraktion
- Kanalisierung im Verschlussmaterial
- Diapirismus (bei Salz in steiler Lagerung)
- Klimatische Prozesse in Abhängigkeit von Teufe des ewG und Lokation des Endlagersystems, vor allem
 - glazigene Rinnenbildung
 - Subrosion
 - Permafrost

Vorgehensweise Ableitung von Entwicklungen

- **Schritt 1: Fragmentierung des Endlagersystems**
 - Identifizierung der Merkmale, Ereignisse und Prozesse
 - Bestimmung der Eintrittserwartung
 - Screening
 - Abhängigkeiten: Kopplungen

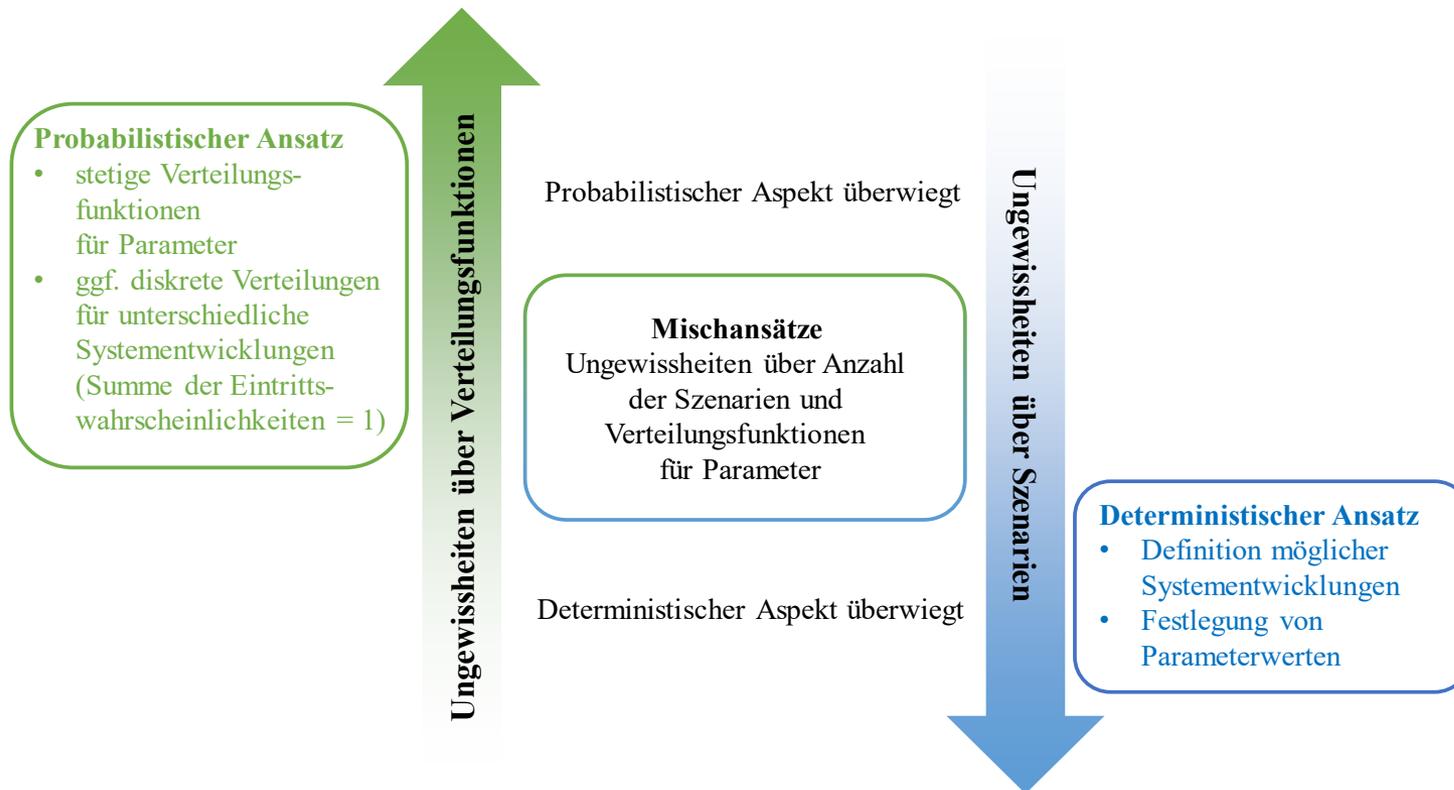
- **Schritt 2: Bewertung der Entwicklung der FEP**
 - Bewertung der Abhängigkeiten
 - Ungewissheiten führen ggf. zu Verzweigungen
 - Fokussierung auf wesentliche Barrieren

- **Schritt 3: Zusammenführung zu Entwicklungen (Szenarien)**
 - Gruppierung von Entwicklungen (Szenariengruppen)
 - Eintrittserwartung bestimmt Kategorie



Entwicklungen vs. probabilistische Rechenfälle

TSPA: vollprobabilistische Analyse des Gesamtsystems

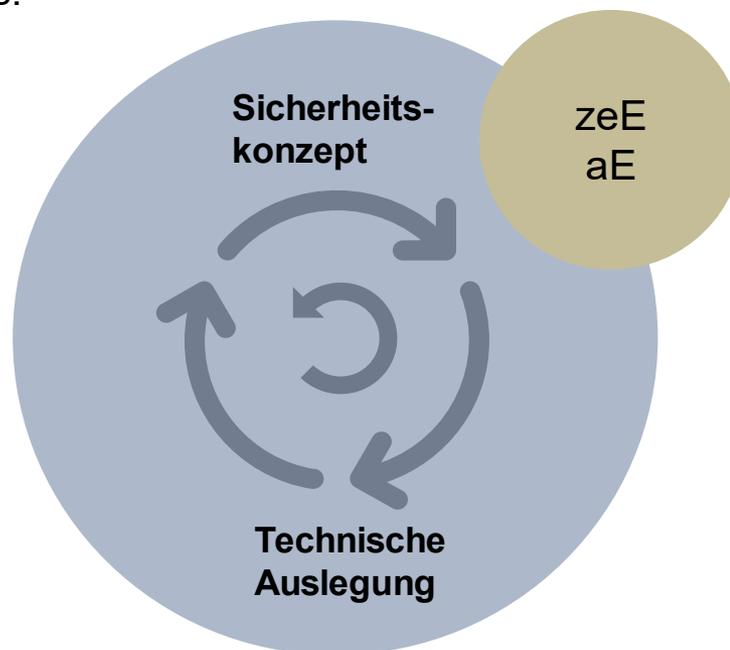


Quelle: Becker et. al 2023

Optimierung des Endlagersystems

Das Sicherheitskonzept und die technische Auslegung des Endlagers sind unter Berücksichtigung aller Umstände des Einzelfalls und unter Beachtung der Ausgewogenheit der Maßnahmen zur Erreichung folgender Ziele zu optimieren:

1. die Langzeitsicherheit des Endlagers, insbesondere die Qualität des sicheren Einschusses der radioaktiven Abfälle und Robustheit des Endlagersystems, sowie
2. die Betriebssicherheit des Endlagers.



Zusammenfassung

- Im Sicherheitskonzept wird dargelegt, wie im Zusammenwirken der natürlichen Gegebenheiten, Prozesse und technischen Maßnahmen die Sicherheit des Endlagers gewährleistet ist.
- Aus dem Sicherheitskonzept werden konkrete Anforderungen an die Endlagerauslegung abgeleitet. Dabei spielen die geotechnischen Barrieren auch im ewG-Konzept eine zentrale Rolle, da sie die unvermeidbare Durchörterung der geologischen Barriere abdichten müssen.
- Die Entwicklung der geotechnischen Barrieren ist über den Bewertungszeitraum darzulegen in:
 - zu erwartende Entwicklungen
 - abweichende Entwicklungen
 - Entwicklungen auf der Grundlage zukünftiger menschlicher Aktivitäten
 - hypothetische Entwicklungen
 - Kriterien für Kategorisierung sind nicht kategorisch festgelegt
- Sehr umfangreiche Arbeiten für Frage nach „Vollständigkeit“ der Analyse

Bedeutung der Korrosion von zementbasierten Abdichtbauwerken in der Langzeitsicherheitsanalyse (LZS)

Umsetzung der FEP/Szenarien
in den Modellen der LZS

Dr. Matthias Niemeyer

Braunschweig, 7. September 2023

Überblick

1. Langzeitsichere korrodierende Abdichtungen?
2. Vom Prozess- und Detailmodell zur Langzeitsicherheitsbewertung
3. Ungewissheiten: Szenarien, Modelle, Parameter
4. Safety Case: mehr als Modellrechnungen
5. Optimierung: iteratives Verfahren

Abdichtungen aus Zement in korrosivem Milieu: Gründe und Voraussetzungen für Anwendung

1. Bewährter Baustoff
2. Begrenzte Anforderungen aus Sicherheitskonzept
3. Physikalische Prozesse und Eigenschaften bestimmen Funktionsdauer des Bauwerks
4. Möglichkeiten zur Optimierung

Abdichtungen aus Zement in korrosivem Milieu: Gründe und Voraussetzungen für Anwendung

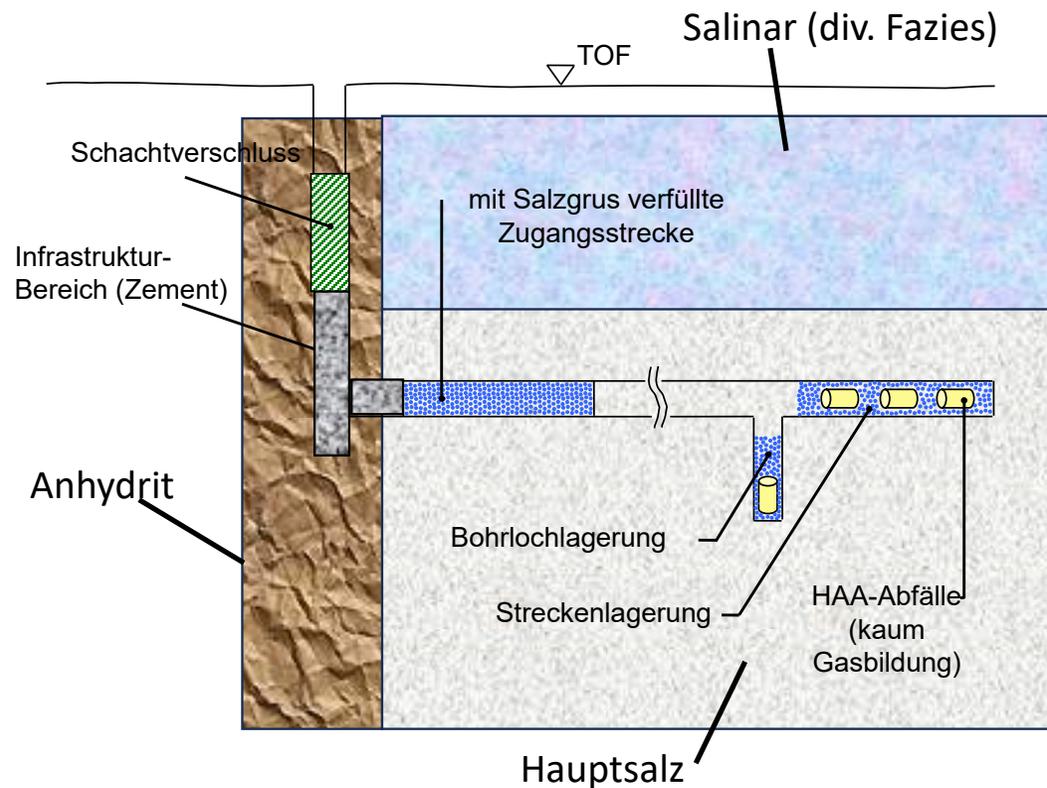
1. Bewährter Baustoff

- Abbindend
- Mineralisch
- Mechanische und hydraulische Eigenschaften
 - Druckfestigkeit
 - Geringe Permeabilität
- Lange bekannt und bewährt
 - Opus caementicium
 - Vgl. natürliche Analoga
- Verfügbarkeit
- Preis

Begrenzte Anforderungen aus Sicherheitskonzept

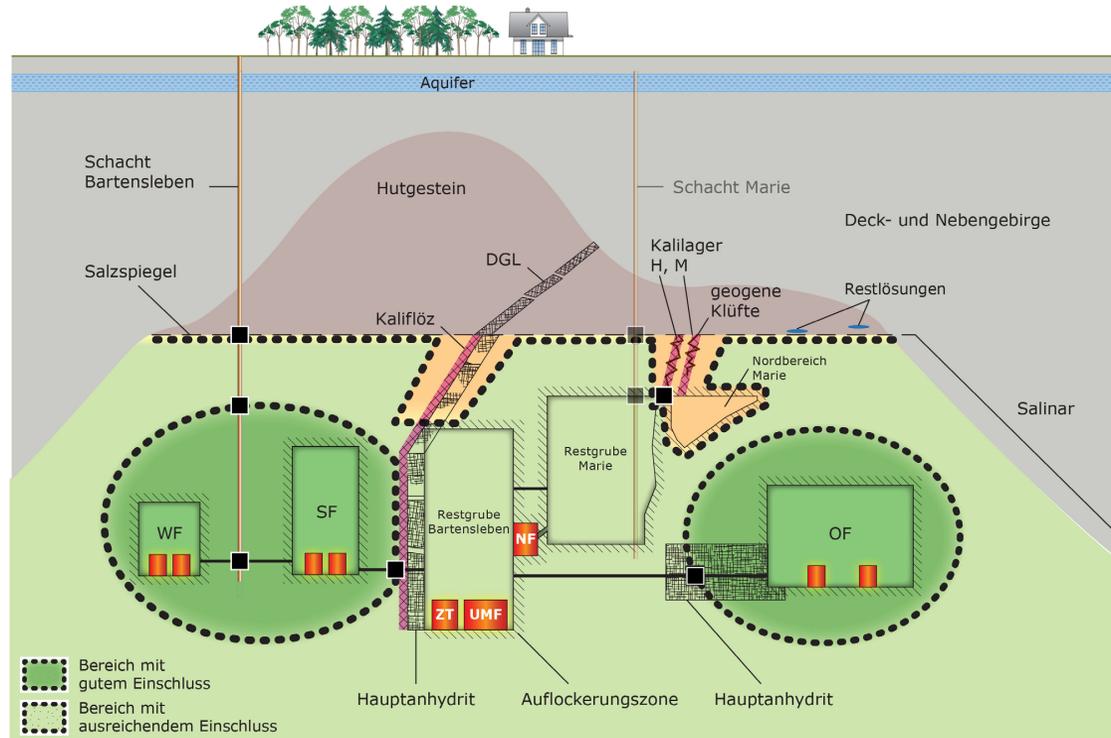
- Endlager für hochradioaktive Abfälle im Steinsalz
 - Zementbasierte Abdichtungen als zusätzliche Barriere
 - Abdichtung des Infrastrukturbereichs
 - Redundanz, Diversität
 - Temporäre Anforderung: Schutz der Barrieren im ewG bei frühem Ausfall Schachtabdichtung
- Endlager für schwachaktive Abfälle (Beispiel ERAM)
 - Sehr geringes anfängliches Radionuklidinventar
 - Radiotoxizität nimmt in 10.000 Jahren um 2 Größenordnungen ab
 - Danach ist Ausfall der Streckenabdichtungen «zu verkraften»

Sicherheitskonzept Steinsalz steile Lagerung (Beispiel VSG; schematisiert):



- ewG im Hauptsalz (Halit)
 - Einlagerung in Strecken
 - Streckenabdichtungen aus Salzgrus
 - Kompaktion durch Konvergenz
 - Abnahme der Porosität → «0»
 - Abnahme der Permeabilität → «0»
 - Dauert einige tausend Jahre
- Schacht / Infrastruktur im Anhydrit
 - Vorteil: Mechanische Stabilität
 - Keine Konvergenz
 - Anstehende Kalisalze (Magnesium)
 - Schachtabdichtung Schotter/Bitumen
 - Verfüllung mit Zement (→ Korrosion)
 - Schützt Abfälle vor frühem Lösungszutritt

Sicherheitskonzept ERA Morsleben (Plan von 2009 – vereinfachte Darstellung):



4651_ene/Berichte/Bericht_4651_259/Abbildungen/Einschlussvermögen_A_Rev2.ai(png)/vho/04.12.2018

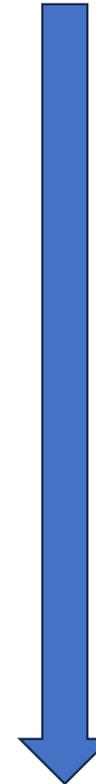
- Integritätserhalt Wirtsgestein
 - Verfüllung mit Salzbeton (Stützwirkung)
 - → Bergrechtliche Schutzziele
 - Begrenzung von Hohlraumneubildung
 - Behinderung von Lösungsbewegung
 - Sorbierende Festphasen
- Abdichtung der Tagesschächte
 - (Großversuch Rollochabdichtung)
- Abdichtung von Einlagerungsbereichen
 - Streckenabdichtungen (Salzbeton)
 - Behinderung von Lösungsbewegung
 - «Einschluss» von Radionuklidinventar

Konzeptualisierung ERAM: Im Folgenden betrachtete (und ausgeklammerte) Teilsysteme **und Prozesse**

- (Hutgestein und Deckgebirge)
- (Überregionale klimatische und geologische Prozesse)
- **Wirtsgestein** (einige FEP im Folgenden ausgeklammert)
- **Sonstiges Grubengebäude** (Tagesschächte und einige weitere FEP im Folgenden ausgeklammert)
- **Einlagerungsgrubenbaue**
- (Subsalinar)

Konzeptualisierung ERAM: Qualitative und quantitative Verknüpfung der FEP (1)

- Lösungszutritt ins Grubengebäude
- Wirtsgestein
- Auflösung und Ausfällung von Salzmineralen
- Hohlräume im Grubengebäude
 - Volumen; Lage
- Lösungen im Grubengebäude
 - Stoffliche Zusammensetzung; Dichte; ...
- Lösungsbewegung
- Versatz
- Korrosion von Materialien mit Zementphasen
- Korrosionsprodukte Zemente
 - Stoffliche Zusammensetzung; Permeabilität
- Lösungen im Grubengebäude
 - Stoffliche Zusammensetzung; Dichte



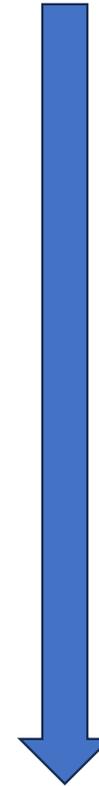
Salzspiegel

Zutrittsbereich

Sonstiges Grubengebäude

Konzeptualisierung ERAM: Qualitative und quantitative Verknüpfung der FEP (2)

- Lösungsbewegung
- Wirtsgestein
- Auflösung und Ausfällung von Salzmineralen
- Lösungen im Grubengebäude
 - Stoffliche Zusammensetzung; Dichte
- Lösungsbewegung
- Streckenabdichtungen aus Salzbeton
- Korrosion von Materialien mit Zementphasen
- Korrosionsprodukte Zemente
 - Stoffliche Zusammensetzung; Permeabilität
- Lösungen im Grubengebäude
 - Stoffliche Zusammensetzung; Dichte
- Lösungsbewegung



Außerhalb
Wirtsgesteinsbarriere um
Einlagerungsbereich
(«Bereich mit gutem Einschluss»)

Geotechnische Barriere

Einlagerungsbereich

Konzeptualisierung ERAM: Qualitative und quantitative Verknüpfung der FEP (3) (innerhalb Einlagerungsbereich)

- Lösungen im Grubengebäude
- Auflösung und Ausfällung von Salzmineralen
- Lösungen im Grubengebäude
- Lösungsbewegung
- Radioaktive Abfälle und betriebliche Reststoffe
- Metallkorrosion
- Mikrobielle Prozesse im Grubengebäude
- Mobilisierung von Radionukliden und grundwasserrelevanten Stoffen
- Komplexbildung
- Auflösung und Ausfällung von Radionukliden und grundwasserrelevanten Stoffen
- Gase im Grubengebäude
 - Stoffliche Zusammensetzung; Druck; Volumen; Löslichkeit; Stoffmenge;

Konzeptualisierung ERAM: Qualitative und quantitative Verknüpfung der FEP (4) (innerhalb Einlagerungsbereich)

- Lösungen im Grubengebäude
- Gasbewegung
- Lösungsbewegung
- Konvergenz
- Transport von Radionukliden und grundwasserrelevanten Stoffen im Grubengebäude
- Gase im Grubengebäude
 - Stoffliche Zusammensetzung; Druck; Volumen; Löslichkeit; Stoffmenge;
- Lösungen im Grubengebäude

Konzeptualisierung ERAM: Modellansätze

1. Kompartimentmodell, Eigenentwicklung (z.B. EMOS, PROSA, KAFKA)
 - Kammern (0-D, Höhenangaben für Strecken, Lösungspegel)
 - Verbindungen (vertikal/horizontal/geneigt)
 - Vereinfachungen / Näherungen für Zweiphasen-Prozesse
2. Zweiphasen-Code, Standard, ggf. modifiziert (z.B. TOUGH3)
 - Kammern, Verbindungen (Diskretisierung nach Bedarf)
 - Zweiphasen-Modellansätze
 - Eigene Codes für spezielle Prozesse (Konvergenz, Korrosion, ...)
 - Forschungsprojekt ZIESEL (GRS)

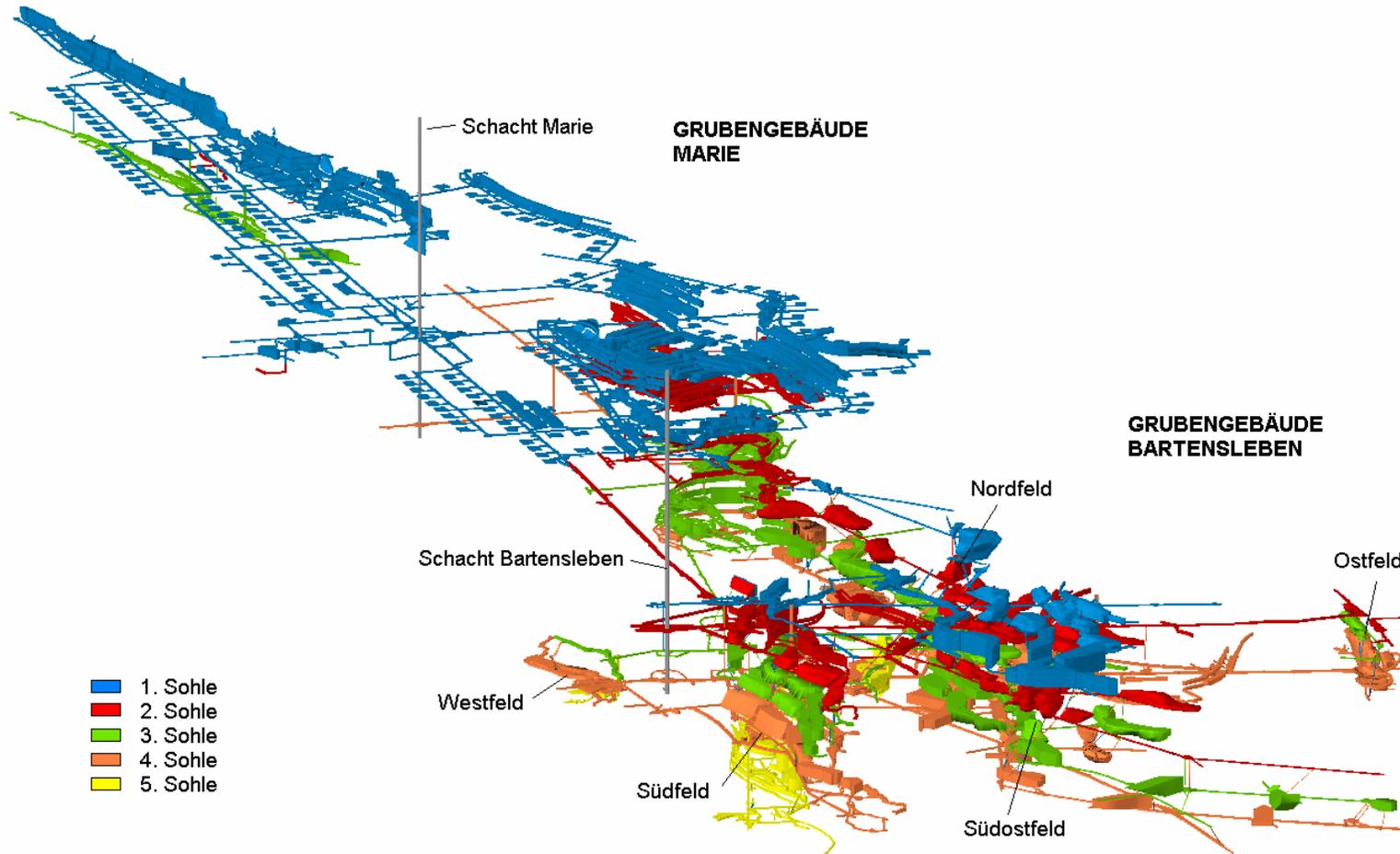
Konzeptualisierung ERAM: Kompartimentmodell

- Kammern (0-D)
 - Versatzvolumina (z.B. Salzgrus, BFA, Abfall, Salzbeton, ggf. unverfüllt)
 - Lösungs-, Gasmengen, Lösungsspiegel, Schadstoffmengen
 - Konvergenz
 - Auflösung und Ausfällung von Salzmineralen
 - Metallkorrosion, mikrobielle Prozesse (→ Gasbildung)
 - Mobilisierung von Schadstoffen, begrenzte Löslichkeit
- Verbindungen (1-D)
 - Hydraulische Eigenschaften, Zweiphasen-Näherung (z.B. porös / geklüftet)
 - Fluidbewegung und Transport
 - Permeabilitätsänderungen (z.B. durch Korrosion oder Hohlraumkonvergenz)

Konzeptualisierung ERAM: Vereinfachungen

- Grubengebäude stark durchbaut
- Aufgelockerte Pfeiler und Schweben
- Einige Wirtsgesteinsbarrieren & geotechnische Barrieren →
Zusammenfassung: «Bereiche mit Einschlusswirkung» (BmEw)
- Ggf. detailliertere Auflösung innerhalb BmEw
 - Realisiert über Strecken und Kammern innerhalb BmEw
- Grundlegende Annahmen zum Zweiphasen-Verhalten
 - Poröser Altversatz, Risse im Salzbeton, geklüftete Schweben:
rasche gravitative Trennung von Gas und Lösung
 - Zweiphasenfluss «homogen-porös» nur in Streckenabdichtungen

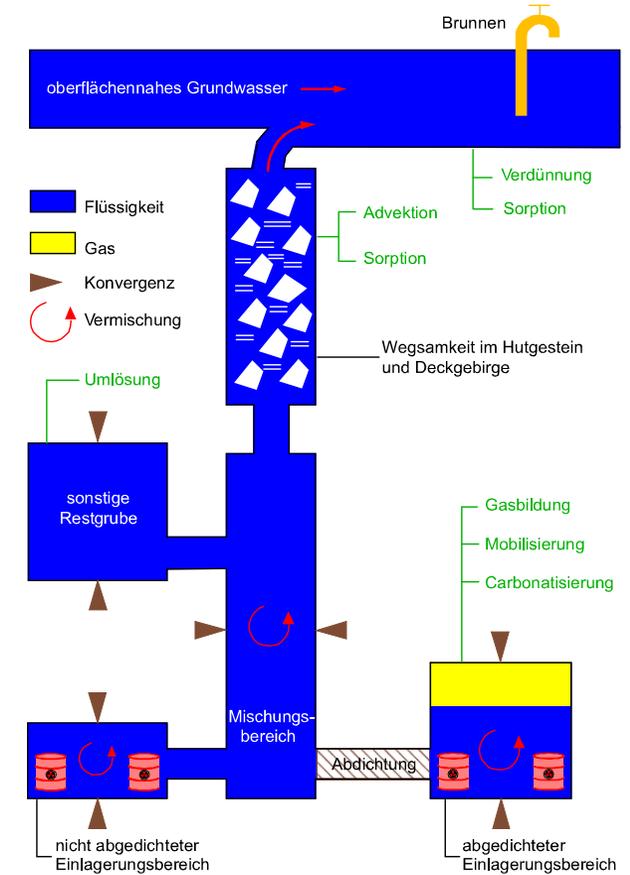
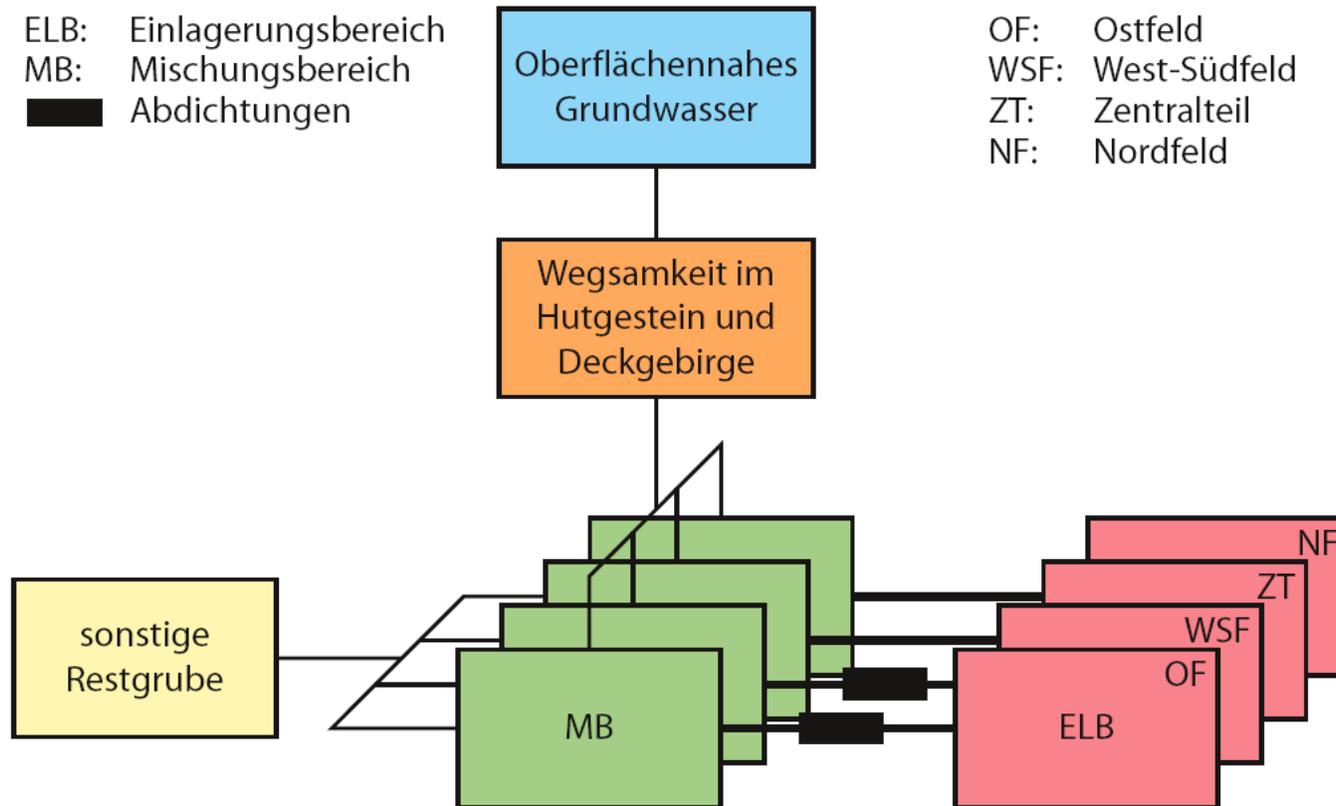
Konzeptualisierung ERAM: Grubengebäude (3-D-Abbild: Grube Bartensleben)



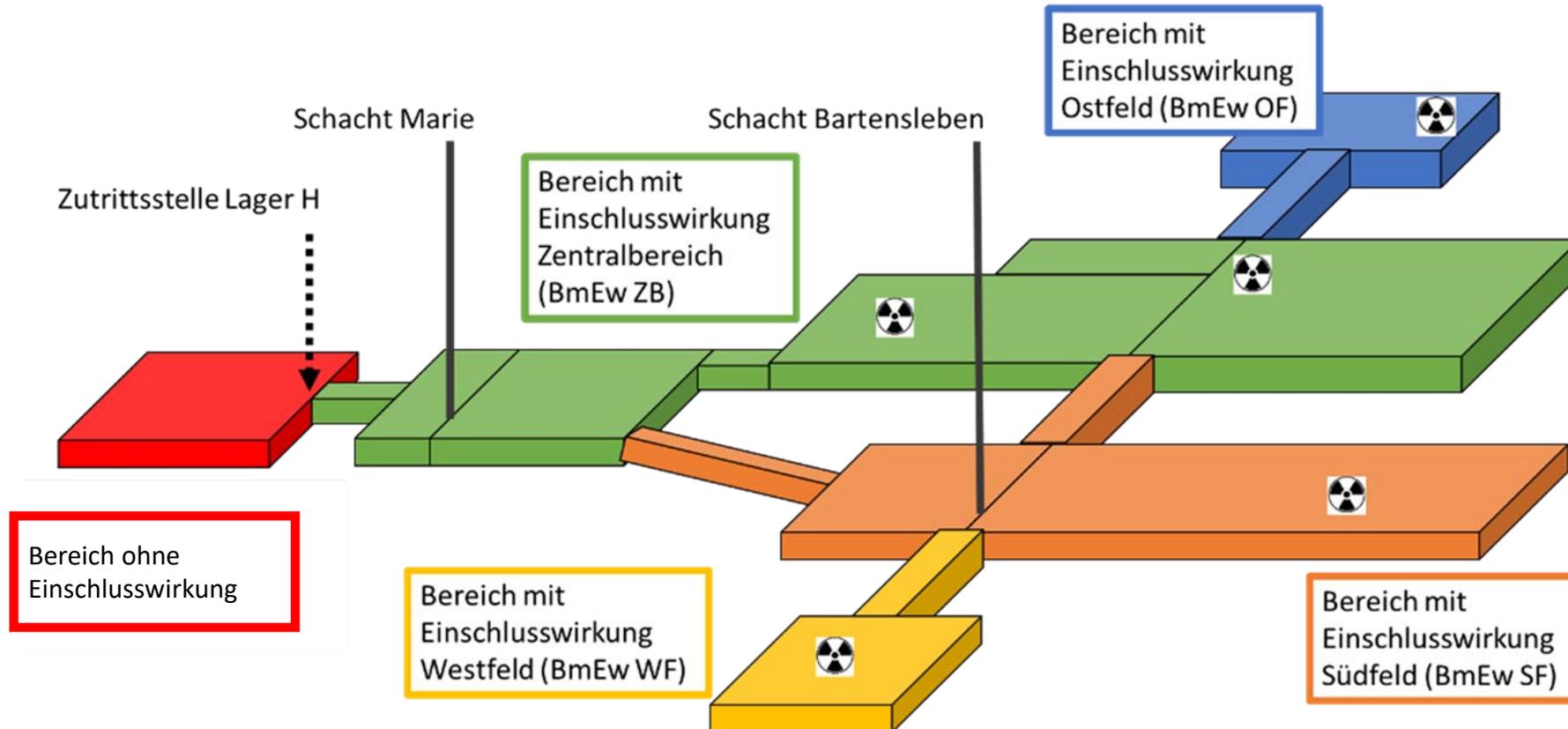
Konzeptualisierung ERAM: (konzeptuelles Modell 2009)

ELB: Einlagerungsbereich
 MB: Mischungsbereich
 ■ Abdichtungen

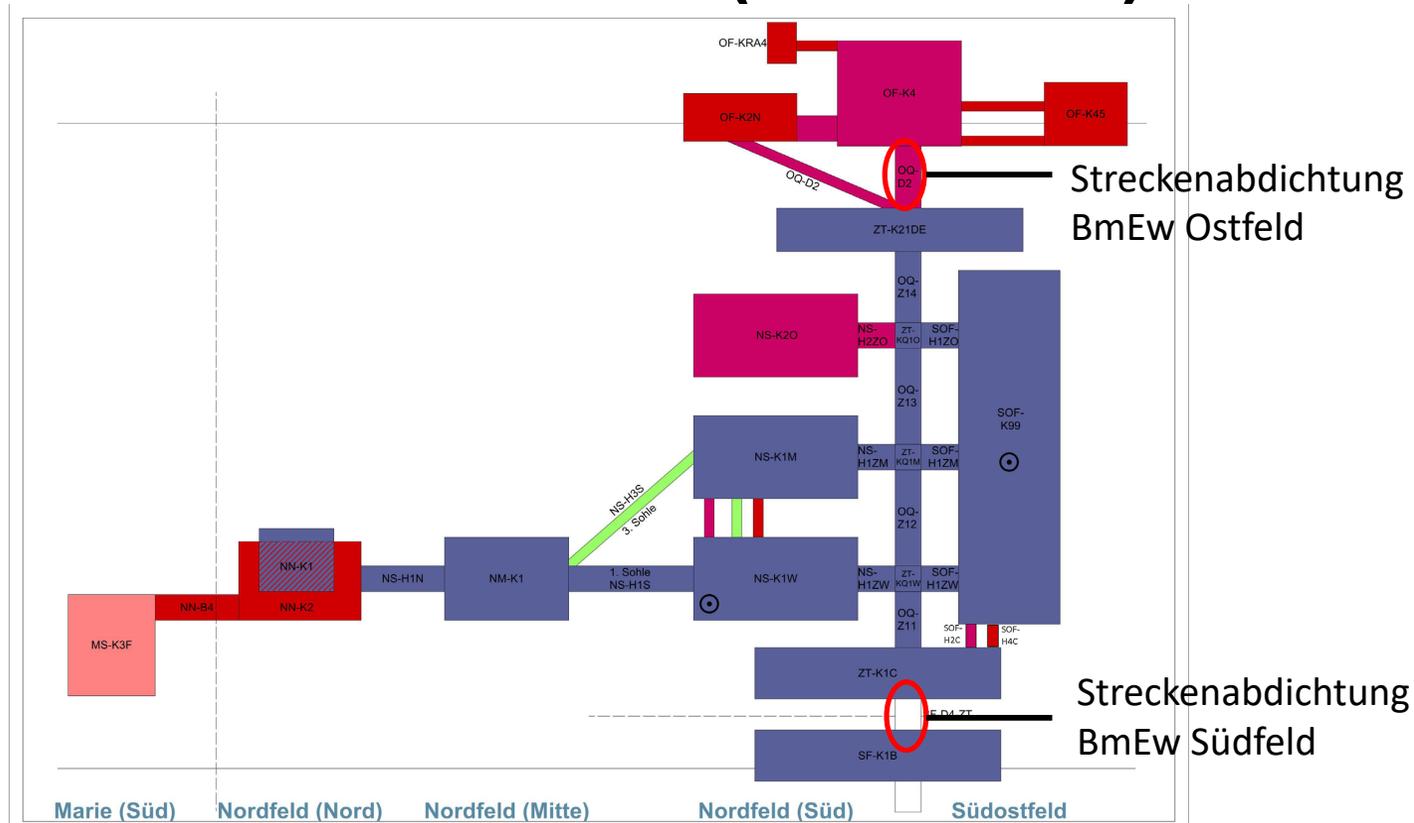
OF: Ostfeld
 WSF: West-Südfeld
 ZT: Zentralteil
 NF: Nordfeld



Konzeptualisierung ERAM: (Skizze „Bereiche mit Einschlusswirkung“)



Konzeptualisierung ERAM – Umsetzung: BmEw Zentralbereich (von oben)

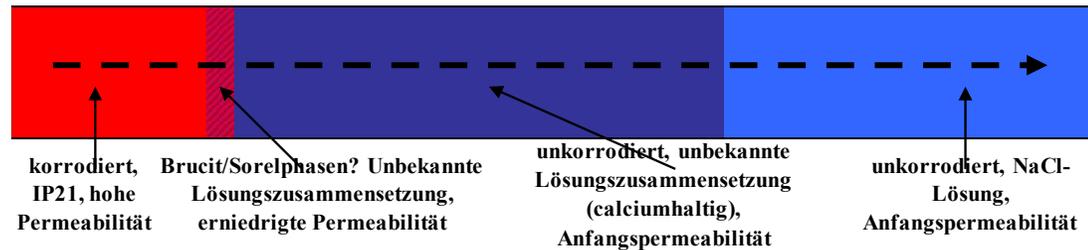


Konzeptualisierung ERAM (2009): Prozess: Korrosion von Streckenabdichtungen

Beispiel-Lokation (Plan 2009)

- Lokation: zwischen den Kalilagern B und C
- Länge: 26 m
- Material: Salzbeton M2
- Permeabilität: 10^{-18} m^2
- Porosität: 20 %

Korrosion von Streckenabdichtungen: 1D-Ansatz für Langzeitsicherheitsbewertung



$$\varepsilon_{tot} \cdot n_{por} = \varepsilon_{tot} + (1 - \varepsilon_{tot}) \cdot \frac{1}{c_M \cdot K_L}$$

$$x_k(t) = \min\left(\frac{V_{w,in}(t)}{n_{por} \cdot \varepsilon_{tot} \cdot A_1 \cdot L_1}, 1\right)$$

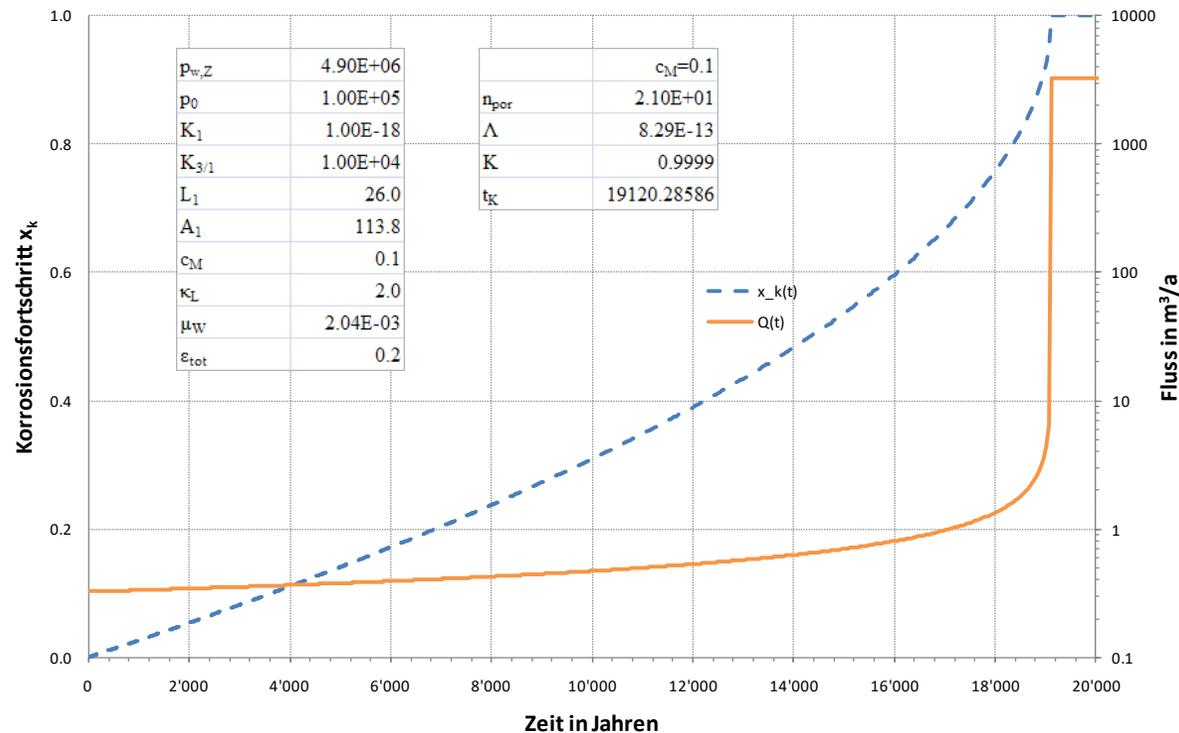
$$Q_1(t) = \frac{K_1}{\mu_w} \cdot \frac{p_{w,z} - p_0}{L_1 \cdot (x_k(t)/K_{3/1} + 1 - x_k(t))} \cdot A_1$$

$$t_K \equiv \frac{\mu_w \cdot L_1^2 \cdot \varepsilon_{tot} \cdot n_{por}}{2 \cdot K_1 \cdot (p_{w,z} - p_0)} \cdot \left(1 + \frac{1}{K_{3/1}}\right)$$

- n_{por} Anzahl Porenwasserzyklen für die vollständige Korrosion von Salzbeton;
- K_L volumetrische Umlösekapazität von IP21-Lösung an Salzbeton, bezogen auf das Feststoffvolumen;
- c_M Mg-Sättigung der zutretenden Lösung in Relation zu IP21-Lösung;
- x_k Verhältnis von korrodierter Länge der Abdichtung zur Gesamtlänge
- $V_{w,in}(t)$ Volumen der Lösung, die bis zum Zeitpunkt t in die Abdichtung zugetreten ist;
- K_1 Permeabilität des Salzbetons vor Korrosion;
- K_3 Permeabilität des Salzbetons nach Korrosion;
- $K_{3/1}$ Quotient aus K_3 und K_1 ;
- μ_w Viskosität der flüssigen Phase;
- t_K Zeitpunkt, an dem die Korrosionsfront das Ende des Abdichtsystems erreicht

Korrosion von Streckenabdichtungen: 1D-Ansatz für Langzeitsicherheitsbewertung

Analytischer 1D-Ansatz: Korrosion einer Abdichtung



- Homogenes Bauwerk:
 - Initialer K-Wert 10^{-18} m^2
 - Ca. 10%-ige Mg-Sättigung
 - ➔ Funktionsdauer 20.000 Jahre
 - ➔ Ausreichend für ERAM-Inventar
 - 1500 Ionisations-Rauchmelder
 - 10 g Radium
 - ^{14}C (Forschungsabfälle)
 - Filter, Dekontamination etc.

Effekte bei Bauwerken aus Salzbeton: Rissbildung, Inhomogenitäten

- Rissbildung nach Abbinden
 - Thermisch induzierte Spannungen
 - Autogenes Schwinden von Salzbeton M2
 - → vgl. Demonstrationsbauwerk im Steinsalz
- Kontaktzone, Risse in Injektion
- Auflockerungszone, Kaliband im Firstbereich
- Sehr langsame Diffusion im Salzbeton
 - Wert: $D_p = 1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$
 - Ursache: Flugasche und NaCl «verstopfen» die Poren
 - → fehlende Homogenisierung in radialer Richtung, 1D-Ansatz nicht gerechtfertigt
- Lösungssättigung des Porenraums nach Nachhärten < 1
 - → Kapillareffekt «saugt» Lösung auf

Risse/ALZ bei Bauwerken aus Salzbeton: Einfache Modellierung Reaktiver Transport

- Abstraktion: Mg-Gehalt der Festphase \triangleq Korrosionsfortschritt
 - «Austausch» Ca in CSH-Phase durch diverse MSH-Phasen fasst komplexe mehrstufige Reaktion zusammen
 - Annahme: Reaktionsrate schnell gegenüber Transportprozessen
 - Permeabilität steigt mit Mg-Gehalt der Festphase

$$R_r(t) = k_r \cdot \frac{C_l}{C_{l,sat}} \cdot \left(\frac{C_s}{C_{l,sat}} - \frac{1}{\kappa_L} \right)$$

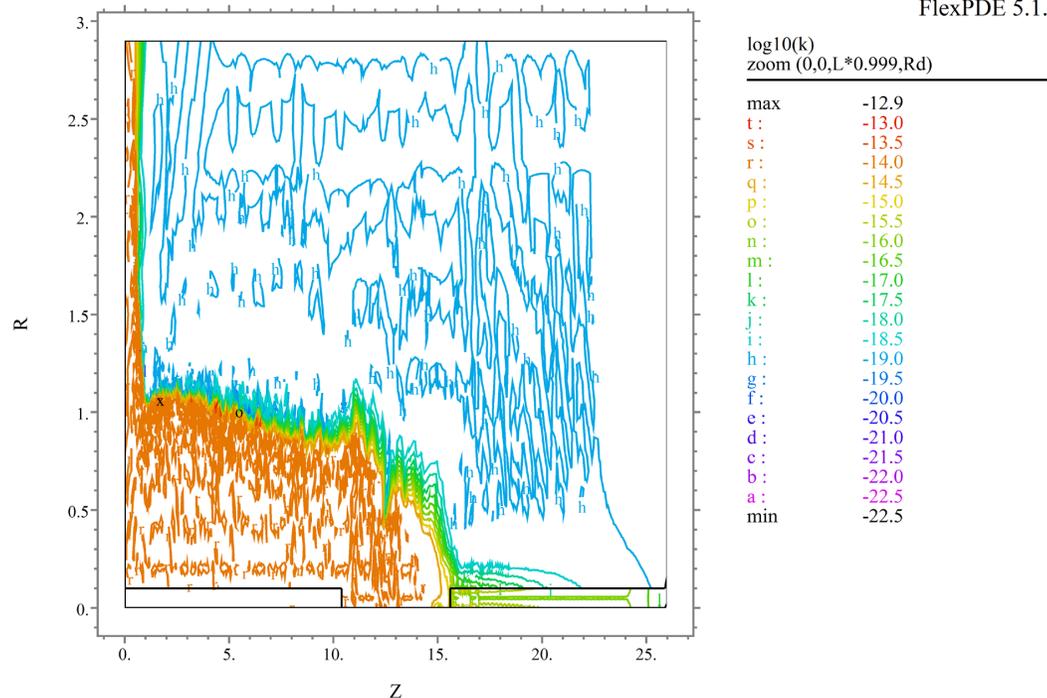
$$\varepsilon \cdot \frac{\partial C_l}{\partial t} = \nabla [D \nabla C_l - v_D C_l] + \varepsilon \cdot k_r \cdot C_l \cdot \left(\frac{C_s}{C_{l,sat}} - \frac{1}{\kappa_L} \right)$$

$$K = K_1 \cdot 10^{\left(\lg(K_{3/1}) \cdot \frac{C_s}{C_{l,sat}} \cdot \kappa_L \right)}$$

Korrosion von Streckenabdichtungen: 2D-Ansatz mit FE-Modell

ERAM, Korrosion einer Abdichtung aus Salzbeton im West-Südfeld mit IP21

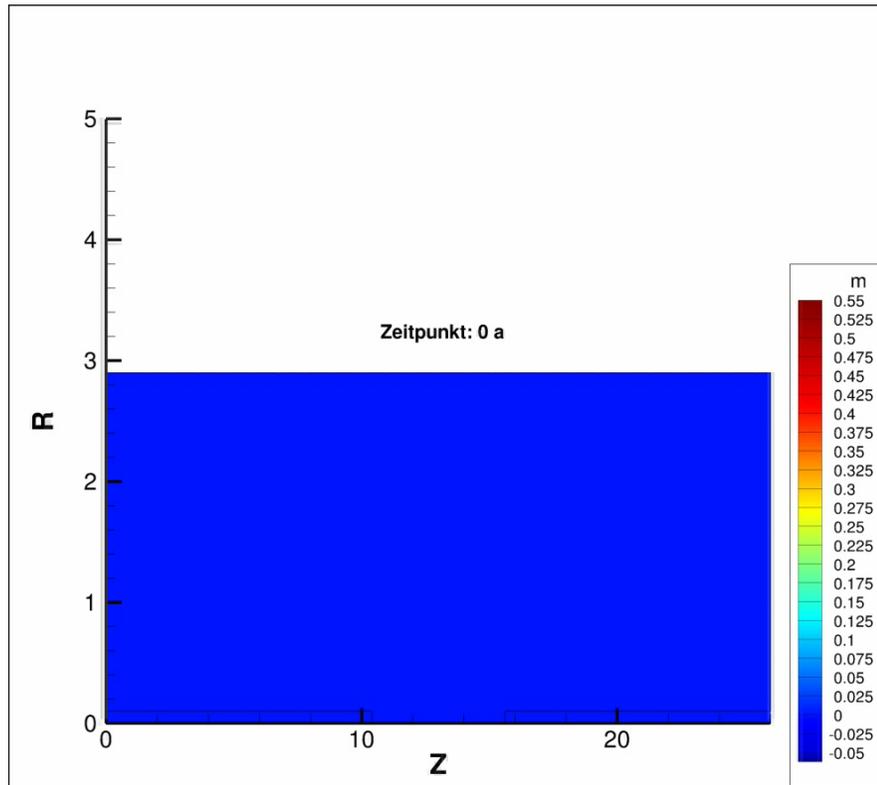
16:06:31 9/9/14
FlexPDE 5.1.4



ERAM_WSF_UK_KLc80_e16_10cm_1d12_1kr7_e5_c1_PeT250: Cycle=5797 Time= 9.0000e+9 dt= 4.5029e-
Vol_Integral=-12769.65

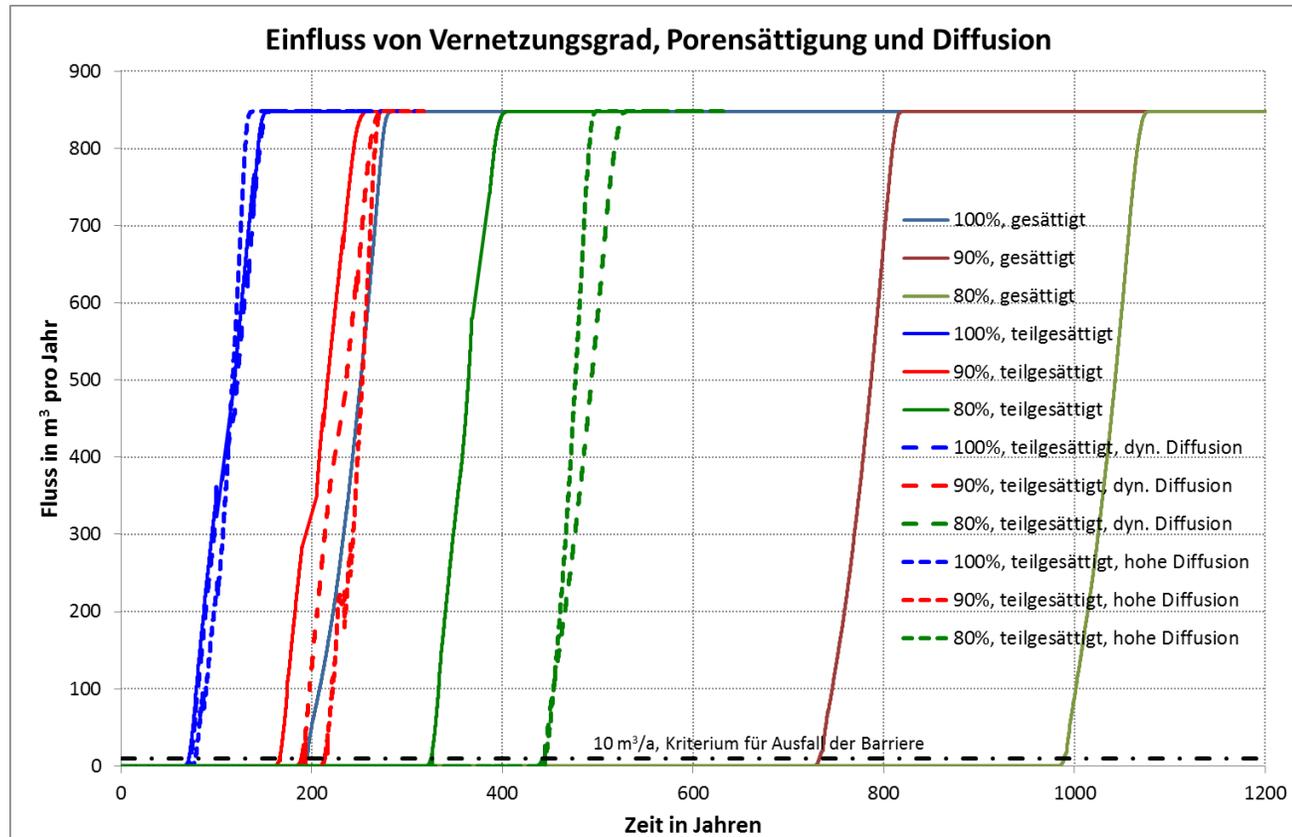
- Permeabilitätsverteilung in einem 2D-radialsymmetrischen Bauwerk mit zentralem Riss, über 80 % der Länge vernetzt, Anfangssättigung 85 %:
- Situation nach 105 Jahren

Korrosion von Streckenabdichtungen: 2D-Ansatz mit FE-Modell



- Permeabilitätsverteilung in einem 2D-radialsymmetrischen Bauwerk mit zentralem Riss, über 80 % der Länge vernetzt, Anfangssättigung 85 %:

Korrosion von Streckenabdichtungen (2D): Einfluss von Risslänge, Sättigung und Diffusion



Korrosion von Streckenabdichtungen: Optimierung des Stilllegungskonzepts

- Korrosionsdauern \ll 1000 Jahre bei Bauwerk mit Rissen nicht optimal
 - Teilweise vernetzte Risse trotz Injektionsmaßnahmen nicht ausgeschlossen
 - (Plastisches) Kriechen von Salzbeton M2 möglich, aber schwer quantifizierbar
 - → Risiko relativ kurzer Funktionsdauern bei Verwendung von Salzbeton
- Optimierungsmöglichkeit bei bekannter Lösungszusammensetzung:
 - Magnesiabinder: stabil bei Mg-Konzentration $> 0,5$ -molal und NaCl-Sättigung
 - Mg-Konzentration ggf. durch Mg-reiche Versatzstoffe gewährleisten
 - Mg-Binder mit 5-1-8-Phasen: Kristallisationsdruck bei Lösungzutritt durch Phasenumwandlung
 - → in eingespanntem Zustand Selbstabdichtung präferentieller Fließpfade

Systematischer Umgang mit Ungewissheiten

(1) Ursachen

- Szenarienungewissheiten
 - Betrachtung ggf. alternativer zu erwartender Entwicklungen
 - Betrachtung abweichender Entwicklungen
 - z.B. alternative Zutritts- oder Lösungspfade
 - → andere Lösungszusammensetzungen bei Abdichtungen und Abfällen
 - Betrachtung abweichender Ausprägungen von FEP (z.B. Tiefe Permafrost)
- Parameterungewissheiten
 - z.B. Häufigkeit der Risse in Salzbeton; Konvergenzraten; Löslichkeiten
- Modellungewissheiten
 - Konzeptualisierung der relevanten Eigenschaften des natürlichen Systems
 - Mathematische Beschreibung der ablaufenden Prozesse
 - Umsetzung des mathematischen in numerisches Modell

Systematischer Umgang mit Ungewissheiten

(2) Bewertung

- Szenarienungewissheiten
 - Entwicklung alternativer konzeptueller Modelle, falls nötig
 - Wahl abweichender Parameter (z.B. stark erhöhte Permeabilitäten)
 - → alternative Rechenfälle (bzw. Klassen von Rechenfällen)
- Parameterungewissheiten
 - Deterministische Parametervariationen → Systemverständnis
 - Verteilungsfunktionen → probabilistische Modellrechnungen
 - → Identifizierung sensibler Parameter
 - → z.B. Häufigkeitsdichten für Dosiswerte
 - → z.B. Wahrscheinlichkeit für Einhaltung radiologischer Schutzziele
- Modellungsgewissheiten
 - Verwendung unterschiedlicher Modelle (sofern verfügbar)

Safety Case: „Das System ist sicher“

- Übersicht über gesamte Argumentationslogik
- Robustheit des Systems
 - Wesentliche Barrieren / «Stützen der Langzeitsicherheit»
 - Hypothetische Entwicklungen: z.B. Weglassen einzelner Barrieren
 - Darstellung von Sicherheitsreserven und Konservativitäten
- Alternative Argumentationslinien
 - z.B. natürliche Analoga
 - Überschlagsrechnungen, Plausibilitätsbetrachtungen, Indikatoren
- Dokumentation der Optimierungsschritte

Safety Case: evidenzgestützt!

- Strukturiertes Dokument
- «Substanz» für spezifische Angaben zur Sicherheit
- Umfassendes Systemverständnis
- z.B. Modellergebnisse
 - Kommt nur heraus, was hineingesteckt wurde?
 - Prüfung unerwarteter Ergebnisse
 - Artefakte?
 - Neue Erkenntnisse über Zusammenhänge?
 - Evidenz durch qualitative / semi-quantitative Argumentation
- Systematischer Umgang mit Ungewissheiten

Safety Case: Systematischer Umgang mit Ungewissheiten

- Numerische Methoden allein genügen nicht:
 - Fehlerfortpflanzung
 - Probabilistik («würfeln»)
- Erkenntnis schaffen!



- Offene Punkte
 - erkennen
 - benennen
 - abarbeiten

Safety Case: «selbsterfüllende Prophezeiung»?

- Beliebtes «Expert Judgement» kann gefährlich sein
 - Meinungen
 - Bauchgefühl
 - Mehrheitsentscheidungen
 - «Festlegungen»
- Antidot: Systematischer Umgang mit «kognitiven Verzerrungen»
 - Katalog, lässt sich individuell / in Gruppe abarbeiten (vgl. RWM 2017)
 - z.B. «Anchoring» (Ankerheuristik)
- Peer-Review
 - Beteiligungsverfahren
 - Internationaler FEP-Katalog



Safety Case: iteratives Verfahren → Optimierung

- Sicherheitskonzept
- Maßnahmen
- Endlagerauslegung
- Forschung und Entwicklung
- FEP-Katalog
- Szenarien
- Langzeitsicherheitsbewertung
- Optimierung



Optimierung (§ 12 EndSiAnfV)

- Sicherheitskonzept
- Technische Auslegung
- Ziele:
 - → Langzeitsicherheit, sicherer Einschluss, Robustheit
 - → Betriebssicherheit
- Fokus: Zu erwartende Entwicklung
- Abschluss: Verhältnismäßigkeit des Aufwands

**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