

**Ableitung der  
wirtsgesteinsspezifischen  
Temperaturverträglichkeit  
von Endlagerkomponenten**

**Tongestein**

## Ableitung der wirtsgesteinsspezifischen Temperaturverträglichkeit von Endlagerkomponenten

### Tongestein

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

Januar 2024

#### **Anmerkung:**

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

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

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

**Deskriptoren**

FEP, Grenztemperatur, Langzeitsicherheit, Standortauswahlgesetz

## **Vorwort**

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

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

## Kurzfassung

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

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

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b> .....	<b>1</b>
1.1	Motivation .....	1
1.2	Anforderungen und Vorgehen.....	3
<b>2</b>	<b>Prüfungsgrundlage</b> .....	<b>7</b>
2.1	Einlagerungskonzept für das Wirtsgestein Tongestein.....	7
2.2	FEP-Liste.....	11
2.3	Randbedingungen und Prämissen .....	15
<b>3</b>	<b>Relevanzprüfung</b> .....	<b>19</b>
3.1	Komponentenspezifische Prüfung .....	20
3.2	Prozessgruppenspezifische Prüfung.....	23
3.3	Einlagerungskonzeptspezifische Prüfung .....	26
3.4	Prozessspezifische Prüfung.....	26
<b>4</b>	<b>Priorisierung</b> .....	<b>29</b>
<b>5</b>	<b>Ableitung von TUF</b> .....	<b>31</b>
5.1	Primäre TUF .....	31
5.1.1	Quellen .....	45
5.1.2	Konsolidierung .....	46
5.1.3	Smektit-Illitisierung.....	47
5.1.4	Wasserdampfeinwirkung.....	48
5.1.5	Quarzzementation .....	49
5.1.6	Mikrobielle Eisenreduktion .....	49
5.1.7	Mikrobielle Sulfatreduktion.....	51
5.1.8	Methanogenese .....	51
5.1.9	Fermentation .....	52
5.1.10	Karbonatzersetzung.....	52
5.1.11	Mineralumwandlung.....	53
5.1.12	Thermochemische Sulfatreduktion.....	53

5.1.13	Lösungsdruck .....	54
5.1.14	Gasdruck .....	54
5.1.15	Mechanisch induzierte H <sub>2</sub> -Bildung .....	54
5.1.16	Pyrolyse.....	55
5.1.17	Thermolabile Organika.....	56
5.1.18	CO <sub>2</sub> -Desorption .....	56
5.1.19	H <sub>2</sub> -induzierte Pyrit-Reduktion.....	57
5.1.20	Karbonatisierung.....	58
5.1.21	Betonkorrosion .....	58
5.1.22	Rissbildung im Beton .....	58
5.1.23	Korrosionsrate .....	58
5.1.24	Korrosionsrate durch H <sub>2</sub> S .....	59
5.1.25	Versprödungsrate .....	60
5.1.26	Viskosität .....	60
5.1.27	Dichte .....	61
5.1.28	Rückhaltung.....	62
5.1.29	Diffusionskoeffizient.....	62
5.1.30	RN-Konzentration .....	63
5.1.31	Thermische Osmose.....	63
5.1.32	Bewertung des Wissenstandes zu den primären TUF .....	63
5.2	Bilanzierungsgrößen.....	66
5.2.1	Porosität .....	67
5.2.2	Lösungsmenge .....	74
5.2.3	Gasmenge .....	75
5.2.4	H <sub>2</sub> S-Menge .....	81
5.3	Abgeleitete TUF.....	84
5.3.1	Korrosion .....	88
5.3.2	Quellfähigkeit.....	91
5.3.3	Fluiddruckänderung .....	96
5.3.4	Advektion / Dispersion (Lösung) .....	98
5.3.5	Advektion / Dispersion (Gas) .....	100

5.3.6	Diffusion (Lösung).....	102
5.3.7	Diffusion (Gas).....	104
<b>6</b>	<b>Ableitung der GTUF .....</b>	<b>107</b>
6.1	Wichtung .....	107
6.2	Ableitung der GTUF für einzelne Komponenten.....	109
<b>7</b>	<b>Ableitung des günstigen Temperaturbereichs für das Gesamtsystem .....</b>	<b>117</b>
7.1	Temperaturverträglichkeit mit den beschriebenen Prämissen .....	118
7.2	Ausblick und weitere Arbeiten.....	120
<b>8</b>	<b>Literatur.....</b>	<b>121</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>133</b>
	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>138</b>
	<b>Abkürzungsverzeichnis.....</b>	<b>139</b>



# 1 Einleitung

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

## 1.1 Motivation

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

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

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

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

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

**Eine Festlegung der Grenztemperatur nach § 27 Abs. 4 StandAG ist ebenso wenig das Ziel dieses Berichtes, wie die Vorgabe einer Temperatur für die Auslegung eines Endlagers im Tongestein.** Die Begriffe „Grenztemperatur“ und „Auslegungstemperatur“ werden daher bei der Analyse der Temperaturverträglichkeiten nicht verwendet. Es ist bei dieser Analyse von einer im Hinblick auf die Temperaturverträglichkeiten der Endlagerkomponenten „günstigen Temperatur“ die Rede. Temperaturverträglichkeit wird dabei im Sinne des Kriteriums zur Bewertung der Temperaturverträglichkeit (gemäß § 24, Anlage 8 Stand AG) verstanden. Dort wird unter diesem Begriff definiert, dass die von Temperaturänderungen infolge der Einlagerung der radioaktiven Abfälle betroffenen Gesteinsformationen so beschaffen sein sollen, dass dadurch bedingte Änderungen der Gesteinseigenschaften sowie thermomechanische Gebirgsspannungen nicht zu einem Festigkeitsverlust und einer Bildung von Sekundärpermeabilitäten im Endlagerbereich führen. Dieses für die geologische Barriere definierte Verständnis von Temperaturverträglichkeit wird im Folgenden auf alle Komponenten in einem Endlagersystem (ELS) übertragen. Eine sicherheitsgerichtete Diskussion günstiger Temperaturen in einem ELS ist nur bei Kenntnis des Wirtsgesteins und des Endlagerkonzeptes möglich /ESK 22/. Im nachfolgenden Unterkapitel wird daher die zugrunde gelegte technische Auslegung und der geplante Betrieb des Endlagers in einer Tongesteinsformation detaillierter beschrieben.

Will man aus den Ergebnissen der Diskussion der Temperaturverträglichkeiten zu geeigneten Temperaturen für die Auslegung eines Endlagers kommen, ist nicht nur die

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

## 1.2 Anforderungen und Vorgehen

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

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

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

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

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

günstige Temperatur bzw. ein günstiger Temperaturbereich bzgl. Integrität sowie RN-Transport für jede Komponente ergibt.

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

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

Die detaillierte Vorgehensweise wird in den folgenden Unterkapiteln beschrieben.



## 2            **Prüfungsgrundlage**

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

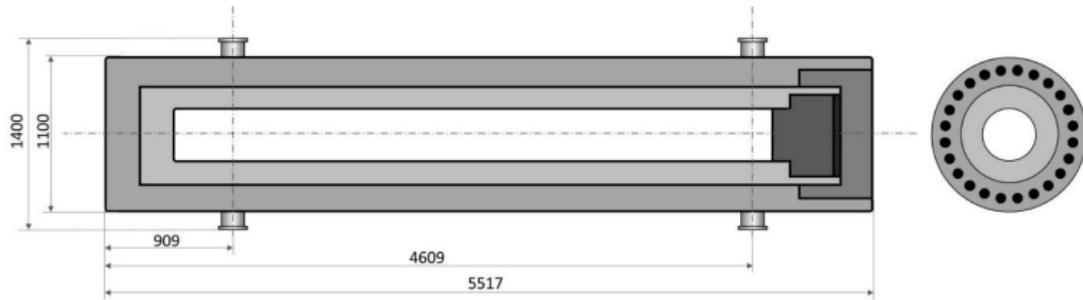
### 2.1            **Einlagerungskonzept für das Wirtsgestein Tongestein**

Die der Analyse einer günstigen Temperatur zugrunde liegende technische Auslegung des Endlagers basiert auf dem Konzept der Streckeneinlagerung von POLLUX-Behältern. Die Ausführungen zur Auslegung und zum Betrieb des Endlagers sind aus /BGE 22/ übernommen. Aufgrund von Einschränkungen hinsichtlich der Wärmeabgabe der Behälter bei der Einlagerung im Tongestein können kleinere Behältertypen mit reduzierter Beladung wie der POLLUX-3-Behälter /JOB 15/ verwendet werden /BGE 22/<sup>1</sup>. In /BER 21/ wurden hierzu Abschirmberechnungen durchgeführt.

Der POLLUX-Behälter besteht aus einem Innen- und einem Außenbehälter. Der Innenbehälter besteht aus Feinkornbaustahl (Werkstoff 1.6210), hat eine Wandstärke von 160 mm und wird durch einen geschraubten Primärdeckel und einen geschweißten Sekundärdeckel dicht verschlossen. In den POLLUX-3-Behälter können 3 DWR-BE, 9 SWR-BE oder 7,5 WWER-BE eingesetzt werden. In Abb. 2.1 ist ein POLLUX-3-Behälter mit Beladung dargestellt. Der äußere Abschirmbehälter ist wie der Primär- und Sekundärdeckel aus Sphäroguss (Werkstoff 0.7040) hergestellt und hat eine Wandstärke von ca. 270 mm. Dieser Abschirmbehälter hat keine Dichtfunktion zu übernehmen und wird mit einem verschraubten Deckel verschlossen. Im Mantel sind in radial verteilten Bohrungen Stäbe aus Polyethylen zur Verringerung der Neutronendosisleistung eingesetzt.

---

<sup>1</sup> Für die Endlagerauslegung im Rahmen der rvSU besteht die Notwendigkeit, Annahmen zu Behältern zu treffen, auch wenn derzeit keine konkreten Behälterkonzepte vorliegen. Diese Annahmen sind insbesondere auf die verwendeten Materialien und die Behältergeometrien bezogen. Sie beeinflussen damit geometrische Aspekte des Endlagerbergwerks und fließen in die thermische Endlagerauslegung zur Einhaltung der Auslegungstemperatur ein. Das POLLUX-Behältersystem wird im Rahmen der rvSU als Grundlage für die Annahme von geometrischen Größen und Materialparametern für Endlagerbehälter für Endlagersysteme im Tongestein verwendet /BGE 22/.

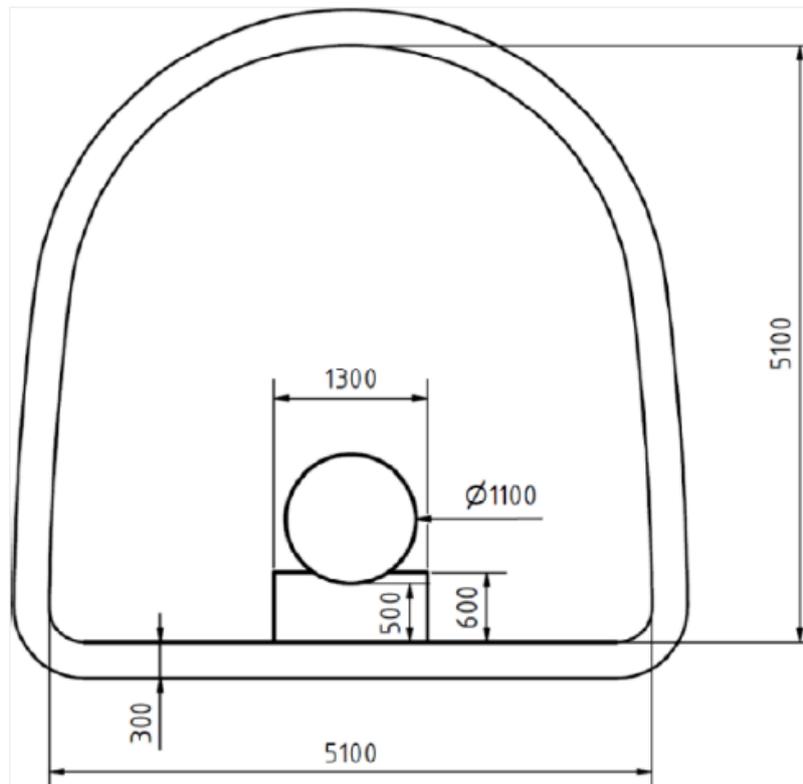


**Abb. 2.1** POLLUX-3-Behälter, mit gezogenen Brennstäben aus 3 DWR-BE  
/BER 21/

Die Einlagerungsfelder liegen in homogenem Tongestein. Einflüsse durch sandige und karbonatische Anteile sind vernachlässigbar (siehe Kap. 2.3).

Grubenräume mit längeren Standzeiten wie dem Infrastrukturbereich, Richtstrecken oder Querschlägen erfordern einen betonbasierten Vollausbau. Je nach Bedingungen kann dieser auch mehrschalig und mit Nachgiebigkeitselementen umgesetzt werden. Der Ausbau muss eine geringe chemische Reaktivität aufweisen sowie dem erwarteten Gebirgs- und Fluiddruck mindestens für die Dauer der Betriebszeit standhalten. Für den Streckenausbau ist eine 30 cm dicke Spritzbetonschicht vorgesehen. Einlagerungsstrecken mit kurzen Standzeiten können mit einem starren Ausbau geringerer Dicke stabilisiert werden. Alternativ ist hier der Einsatz eines Anker-Stahlnetzsystems bei sehr günstigen Bedingungen denkbar. Dem Ausbau wird in der Nachverschlussphase keine Sicherheitsfunktion zugewiesen. Folglich ist seine Integrität nicht mehr von Bedeutung.

Endlagergebäude werden auf einem Sockel aus Formsteinen mit hohem Tonmineralanteil eingelagert, um einen direkten Kontakt des Endlagergebäudes zum Betonausbau oder Fahrbahnmaterialien zu vermeiden (Abb. 2.2).



**Abb. 2.2** Querschnittsprofil der Einlagerungsstrecke mit Ausbau und Gebinde mit bestrahlten Brennelementen für die Streckenlagerung wärmeentwickelnder Abfälle /BGE 22/

Nach der Einlagerung erfolgt die Verfüllung des Hohlraumes mit einem Versatz aus quellfähigen Tonmineralen, damit der Behälter allseitig von Ton umgeben ist. Der Versatz erfolgt sukzessive: innerhalb der Einlagerungsstrecken wird der Hohlraum um ein Endlagergebände herum direkt nach dessen Einlagerung verfüllt. Querschnitte und Abschnitte der Richtstrecken werden verfüllt, sobald sie für den Betrieb des Endlagers nicht mehr notwendig sind. Auch in den Richtstrecken wird ein tonhaltiger Versatz verwendet /BGE 22/. Bis zur Festlegung des genauen Materials werden durch /BGE 22/ die Materialkennwerte von Bentonit angenommen. Das Verfüllmaterial besteht überwiegend aus arteigenem Ausbruchsmaterial mit Beimischungen von quellfähigen Tonmineralen wie dem Calcium-Bentonit (Ca-Bentonit), um eine möglichst hohe Homogenität der Versatzmaterialien zu gewährleisten.

Der Betrieb des Endlagers beginnt mit der ersten Anlieferung radioaktiver Abfälle. Im Wesentlichen bestehen die untertägigen Tätigkeiten im Betrieb aus der Auffahrung von Einlagerungsstrecken, der Einlagerung von Endlagergebänden und der anschließenden Verfüllung von Einlagerungsstrecken, Querschnitten und nicht weiter genutzten Teilen

der Richtstrecken. Der Betrieb beginnt im schachtfernsten Einlagerungsfeld. Die Auffahrung der Einlagerungsstrecken, die Einlagerung und die Verfüllung schreiten von dort aus in Richtung der Schächte fort. Zwischen jedem Querschlag und der Richtstrecke des Einlagerungsbetriebs werden Wetter- und Zugangsbauwerke errichtet. Nach vollständiger Errichtung eines Einlagerungsfeldes mit Einlagerungsstrecken wird für dieses Feld das Wetterbauwerk zum Übergang vom Querschlag zur Richtstrecke des Auffahrungsbetriebs verschoben. Diese Bauwerke dienen der Trennung des Endlagerbergwerks in Kontrollbereich und Überwachungsbereich sowie der Regulierung der Wetterströme.

Nach der Übergabe des ersten Einlagerungsfeldes an den Einlagerungsbetrieb beginnt die Auffahrung des nächsten Feldes vom benachbarten Querschlag aus. Der Auffahrungsbetrieb, bestehend aus dem Bergbauschacht, der Richtstrecke des Auffahrungsbetriebs und den in Auffahrung befindlichen Einlagerungsfeldern, wird aufgrund der bergbaulichen Tätigkeiten dem Überwachungsbereich zugeordnet. Sämtliche damit in Zusammenhang stehenden Transporte von Gestein, Ausbau, Material und Personen erfolgen daher im Regelfall über diese Verbindung. Auf dem gleichen Weg strömen frische Wetter in das Endlager. Vom Hauptwetterstrom im Querschlag aus werden die Einlagerungsstrecken über Wetterlütten und Lüfter sonderbewettert. Die Abwetter strömen in den Querschlag zurück, wo sie vom Hauptwetterstrom erfasst, verdünnt und in Richtung Kontrollbereich abtransportiert werden. Am Übergang zur Richtstrecke des Einlagerungsbetriebs gehen sie über ein entsprechendes Wetter- und Zugangsbauwerk in den Kontrollbereich über und werden durch den Endlagergebindertransporterschacht aus dem Endlager geleitet.

Der Einlagerungsbetrieb transportiert die Endlagergebände über den Endlagergebindertransporterschacht in das Endlager und dann, gleisgebunden, über die Richtstrecke des Einlagerungsbetriebs in das jeweilige Einlagerungsfeld. Im Querschlag vor der jeweiligen Einlagerungsstrecke nimmt die Einlagerungsvorrichtung den Behälter auf und transportiert ihn in die Einlagerungsstrecke. Hier legt sie ihn zentral in der Strecke auf dem Sockel aus Formsteinen ab und verlässt die Einlagerungsstrecke. Das Verfüllmaterial der Einlagerungsstrecke wird über den gleichen Weg von über Tage in das Einlagerungsfeld transportiert.

Der Streckenabschnitt um ein Endlagergebände herum wird direkt nach dessen Einlagerung vollständig mit Bentonit oder quellfähigem Tonmaterial verfüllt und ggf. jeweils mit einem Streckenverschluss verschlossen. Im Anschluss kann der nächste Einlagerungsvorgang beginnen. Wie bei der Auffahrung beginnt auch die Einlagerung angrenzend zur

Richtstrecke des Einlagerungsbetriebs und setzt sich dann bis zur Richtstrecke des Auffahrungsbetriebs fort. Die Wetter gelangen dann aus dieser Richtstrecke über ein Wetter- und Zugangsbauwerk in den Kontrollbereich im Querschlag. Wie im Auffahrungsbetrieb wird dem durchgehenden Hauptwetterstrom für die Sonderbewetterung der Einlagerungsstrecke ein Teil entnommen.

Sind alle Einlagerungsstrecken eines Einlagerungsfeldes mit Endlagergebinden beladen und verfüllt, folgt schließlich auch die Verfüllung des zugehörigen Querschlages und der Richtstrecken bis etwa zum nächsten Querschlag. Der Querschlag und die Richtstrecke des Einlagerungsbetriebs, die vollständig dem Kontrollbereich zugeordnet sind, werden durch den Einlagerungsbetrieb gefüllt. Die Verfüllung beginnt am Wetterbauwerk des Einlagerungsfeldes zur Bergbaustrecke und setzt sich im Rückbau fort. Hierfür ist eine starke Sonderbewetterung einzusetzen. Die Verfüllung des Abschnitts der Richtstrecke des Auffahrungsbetriebs kann mit Gestein aus dem aktuellen Auffahrungsbetrieb oder auch über den Bergbauschacht erfolgen. Auf diese Weise muss der Kontrollbereich nicht erweitert werden und Gestein aus der Auffahrung kann mit geringem Aufwand genutzt werden. In den Richtstrecken zwischen den Einlagerungsbereichen und dem Infrastrukturbereich werden Streckenverschlüsse aus je zwei Betonwiderlagern und zwei Bentonit-Dichtelementen installiert an die sich ein weiteres Bentonit-Dichtelement, ein Asphaltdichtelement und ein erneutes Betonwiderlager anschließen. Streckenverschlüsse in den Einlagerungsbereichen werden ebenso oder mit nur einem Bentonit-Dichtelement umgesetzt.

Für Verfüllsäulen (Schacht) und Widerlager können Hartgesteinsschotter aus Basalt oder Quarzsand eingesetzt werden. Dichtelemente bestehen aus Bentonit oder aus wechselnden Bentonit- und Sandelementen (Bentonit mit Äquipotenzialsegmenten). Die Sandelemente sorgen hierbei für eine gleichmäßigere Verteilung von Lösung und damit für ein gleichmäßigeres Quellen der Tonminerale. Genauso sind Dichtelemente aus Bitumen und Asphalt oder Beton möglich /BGE 22/. Der Aufbau des Schachtverschlusses ist abhängig vom standortspezifischen geologischen Profil. Ein mögliches Konzept für einen Schachtverschluss kann /JOB 15/ oder /HER 20/ entnommen werden.

## **2.2 FEP-Liste**

Die Analyse einer FEP-Liste wird gemäß Begründungstext der EndISiAnfV zu § 3 /BUN 20/ als wichtiges Element eines systematischen Vorgehens nach dem internationalen

Stand von Wissenschaft und Technik gesehen. Grundidee einer FEP-Analyse ist die Fragmentierung des ELS in seine Bausteine, den Komponenten und Eigenschaften (Features) sowie den einwirkenden Ereignissen (Events) und Prozessen (Processes). Die Fragmentierung des ELS erlaubt eine einfachere Analyse zur Entwicklung dieser Prozesse im ELS. Aus der Analyse der einzelnen Bausteine des ELS können Rückschlüsse zum Gesamtsystem gezogen werden.

Als Standard wird international die abgestimmte FEP-Liste der OECD/NEA anerkannt /NEA 19/. Im Vergleich zu der FEP-Liste der OECD/ NEA bietet die in /FRE 20/ erstellte FEP-Matrix ein nachvollziehbareres System zur Identifikation der verschiedenen FEP sowie zu jedem individuellen FEP eine Auflistung assoziierter Prozesse<sup>2</sup>, die eine Bewertung der zugrunde liegenden Prozesse in einem ELS in größerer Detailtiefe erlaubt (Abb. 2.3). Die größere Detailtiefe ermöglicht auch eine bessere Bewertung von Kopplungen zwischen den Prozessen. Es muss hier angemerkt werden, dass im Rahmen dieses Vorhabens ausschließlich dieses Systems zur Identifikation der FEP nach /FRE 20/ verwendet worden ist. Das System ordnet alle FEP in der Matrix gemäß folgendem Schema:

KK.XX.PP.YY.a

KK: Bezeichnung der übergeordneten ELS-Komponente

XX: Identifikationsnummer der ELS-Komponente

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

YY: Identifikationsnummer der Eigenschaft-, Ereignis, Prozessgruppe

a: Assoziierter Prozess

Dieses Nummerierungssystem erlaubt die schnelle Zuordnung der Eigenschaften, Ereignisse und Prozesse anhand der FEP-Nummern. Die Abkürzungen können Abb. 2.3 entnommen werden. Beispielsweise steht „BB“ für Buffer and Backfill (Buffer und Versatz) und „TM“ für mechanische und thermomechanische Prozesse. Diese Abkürzungen werden in den Tabellen in Kapitel 3.1 verwendet. Es muss an dieser Stelle angemerkt werden, dass eine „00“ aufweisende Identifikationsnummer zwar mehrere ELS-Komponenten, allerdings nur selten alle dazugehörigen übergeordneten Eigenschafts-,

---

<sup>2</sup> Prozesse und Ereignisse werden in diesem Bericht nicht unterschieden. Sie werden gemeinsam unter dem Begriff „Prozesse“ subsumiert. Eine Unterscheidung ist für die Ableitung einer günstigen Temperatur in einem ELS ohne Bedeutung.

Ereignis- und Prozessgruppen umfasst. Beispielsweise sind in der ELS-Komponente „Wirtsgestein“ (HR.00) biologische und thermo-biologische Prozesse (TB.) aufgelistet, welche allerdings nicht in weiteren wirtsgesteinsbezogenen Komponenten, wie der Auflockerungszone (HR.01) oder dem einschlusswirksamen Gebirgsbereich (HR.02) berücksichtigt worden sind. Es wurde daher entschieden, diese FEP in die jeweiligen übergeordneten Prozessgruppen zu kopieren und sie an diesen Stellen zu analysieren.

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

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

Insgesamt enthält die der FEP-Matrix zugrundeliegende FEP-Liste 500 individuelle FEP, welche mit über 600 individuellen assoziierten Prozessen kombiniert werden können.

Die Kombination aus den FEP und den verschiedenen assoziierten Prozessen resultiert in einer Gesamtzahl von über 2.000 verschiedenen Datensätzen /FRE 20/. Diese Datensätze sind in einer MS-Excel®-basierten Datenbank zusammengestellt und bilden die Grundlage der Relevanzprüfung und der Priorisierung. Es muss angemerkt werden, dass die Datensätze einer Konsistenzprüfung unterzogen worden sind, um die Vollständigkeit der Datensätze sicherzustellen. Die Prüfung bestand zunächst in einem Vergleich, ob die assoziierten Prozesse in einem FEP in einer Komponente gleich oder ähnlich in einem gleichlautenden FEP in einer anderen Komponente aufgelistet sind. Fehlende assoziierte Prozesse sind in den entsprechenden Komponenten hinzugefügt worden. Zudem umfasst die Prüfung den Vergleich mit anderen FEP-Katalogen /BRA 19/, /JAH 13/, /JAH 16/, um gänzlich fehlende assoziierte Prozesse (z.B. Pyrolyse, Quarzzementation) zu identifizieren und hinzuzufügen.

### **2.3 Randbedingungen und Prämissen**

Für die Durchführung der Untersuchungen ist es notwendig, einige Randbedingungen bzw. Prämissen festzulegen. Die Prämissen unterscheiden sich teilweise für die verschiedenen Wirtgesteine, sie sind daher nicht in jedem Fall allgemeingültig. Im folgenden Kapitel werden für das Endlagersystem im Wirtsgestein Tongestein die wesentlichen Prämissen eingeordnet und erläutert; bezüglich der umfassenden Auflistung der Prämissen für die Endlagersysteme in den Wirtsgesteinen Steinsalz und Kristallingestein wird auf die jeweiligen Berichte verwiesen.

Die Notwendigkeit, Prämissen aufzustellen, resultiert aus verschiedenen Ursachen:

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

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

Eine der Prämissen für den konzeptuellen Modellansatz betrifft die Abgrenzung der Komponenten Auflockerungszone (ALZ) und einschlusswirksamer Gebirgsbereich (ewG): Die ALZ wird als Zone definiert, welche sich im Gebirge um die bergmännisch aufgefahrenen Hohlräume ausbildet, und dessen hydraulischen sowie mechanischen Eigenschaften sich bedeutend von denen des intakten Tongesteins - insbesondere durch eine mobile Gasphase im Porenraum und eine um mehrere Magnituden erhöhte Permeabilität – unterscheiden. Dementsprechend kann Tongestein als ewG definiert werden, welches durch einen gesättigten Porenraum und eine geringe Permeabilität charakterisiert ist. Im ewG sind weder Lösungsbewegung noch advektiver und konvektiver Stofftransport von relevantem Einfluss. Diffusion findet statt.

Eine weitere solche Prämisse schließt eine separate Komponente für eine Opferschicht zwischen Behälteroberfläche und Versatz bzw. ALZ (vorerst) aus.

Prämissen für die Standortbedingungen im Wirtsgestein Tongestein betreffen beispielsweise die Gesteinsformation für die Ausweisung des ewG:

- Es wird unterstellt, dass die Mächtigkeit der ungestörten Tonformation hinreichend groß ist, um die Einwirkung von sandigen bzw. karbonatischen Schichtgliedern der Tonformation oder tonformationsfremden Gesteinseinschlüssen (z.B. Sandlinsen, Pyritknollen) als vernachlässigbar einzustufen.
- Es wird unterstellt, dass Mutationen von Mikroben nicht grundsätzlich ausgeschlossen werden können, aber die Systemeinwirkungen eines kleinen Anteils mutierter Mikroben im Vergleich zu denen durch nicht mutierte Mikroben als vernachlässigbar eingeschätzt werden.
- Es wird unterstellt, dass im ewG keine freie Gasphase existiert, vgl. /JAH 16/, Kap. 4.11. Die thermochemische Sulfatreduktion findet zwar statt, beeinflusst jedoch weder das Gesamtsystem (z. B. den Gasdruck) noch die Integrität des ewG.

Prämissen für das Einlagerungskonzept im Wirtsgestein Tongestein betreffen auch den Versatz aus Bentonit oder quellfähigem Ton:

Es wird unterstellt, dass Ausbruchsmaterial – sofern dieses zusätzlich zu einem Bentonit als Streckenversatzmaterial eingesetzt wird – aus der Auffahrung des Endlagerbergwerks stammt und nach dem Einbau die mittlere Luftfeuchtigkeit in der Grube aufweist.

- Für den Versatz wird eine anhaltend formschlüssige Anbindung an die Kontur der Grubenräume unterstellt.
- Der Ausbau wird dem Gebirgs- und Fluiddruck mindestens für die Dauer der Betriebszeit standhalten. In der Nachverschlussphase wird ihm keine Funktion mehr zugewiesen, weshalb seine Integrität nicht von Relevanz ist.

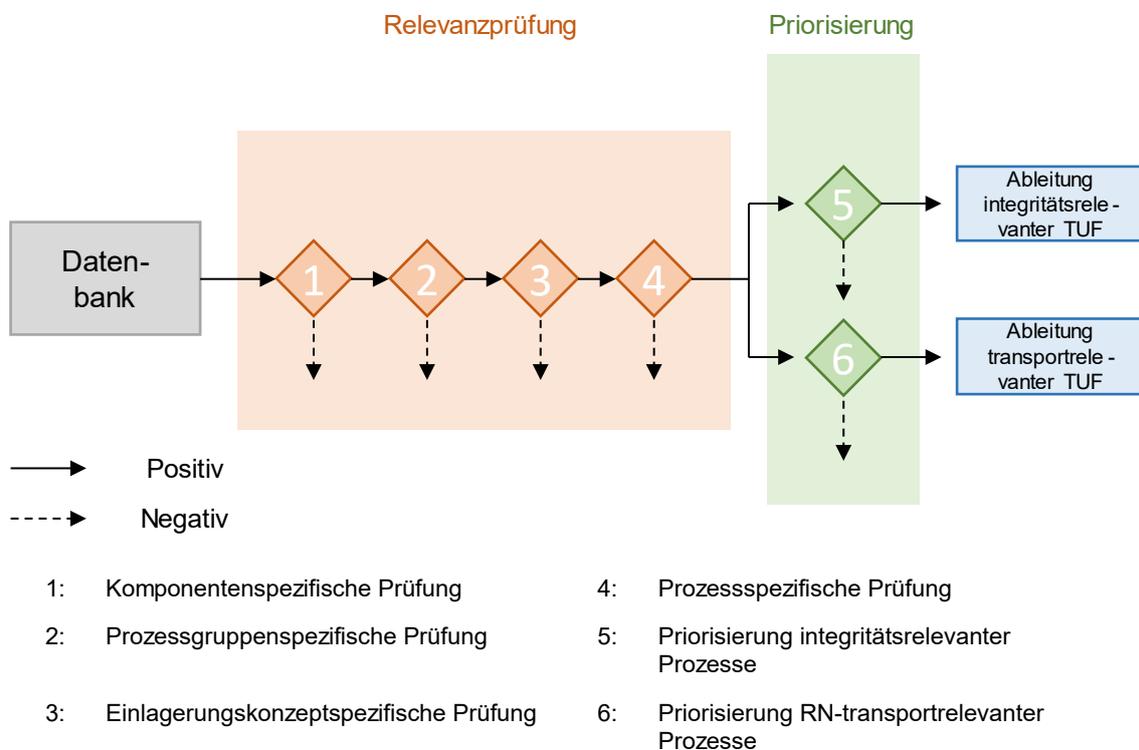
Die prozessspezifischen Prämissen umfassen u. a. Prozessabläufe in Komponenten vom Behälter bis zum ewG, die bei der Bewertung der Temperatur(un)verträglichkeit entweder uneingeschränkt berücksichtigt werden oder aber keine Berücksichtigung finden:

- Für die Komponente Behälter(oberfläche) wird die aerobe Metallkorrosion für die integritätsrelevanten Eigenschaften vernachlässigt, da die aeroben Redoxbedingungen nur einen kurzen Zeitraum (Wochen bis Monate) unmittelbar nach dem Verschließen eines Einlagerungsorts aufgrund des Sauerstoffverbrauchs anhalten /GIR 18/; für RN-transportrelevante Eigenschaften werden die Einwirkungen in benachbarten Komponenten (Versatz, ALZ) berücksichtigt.
- Es wird eine uneingeschränkte Verfügbarkeit von Wasser bzw. Lösung an der Behälteroberfläche unterstellt, siehe unten. Die Wässer bzw. Lösungen weisen relevante Salzgehalte auf, u. a. Sulfat und Chlorid.
- Für die Komponente Versatz wird unterstellt, dass aufgrund einer hohen initialen Saugspannung im Bentonit oder im quellfähigen Ton die Lösung sehr schnell (innerhalb der Bergungsfrist) vordringen kann und Kapillareffekte danach vernachlässigbar sind. Damit wird für die Korrosion der Behälteroberfläche Lösung in ausreichendem Maße zur Verfügung stehen.
- Es wird unterstellt, dass der Versatz durch vordringende Lösung nicht erodiert wird.
- Es wird unterstellt, dass die Auswirkungen einer Betonschale (Ausbau) auf das geochemische Milieu in der ALZ auf wenige cm begrenzt werden und damit nicht relevant sind.
- Es wird unterstellt, dass Konvektion den RN-Transport in allen Komponenten außer dem ewG beeinflusst.

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

### 3 Relevanzprüfung

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

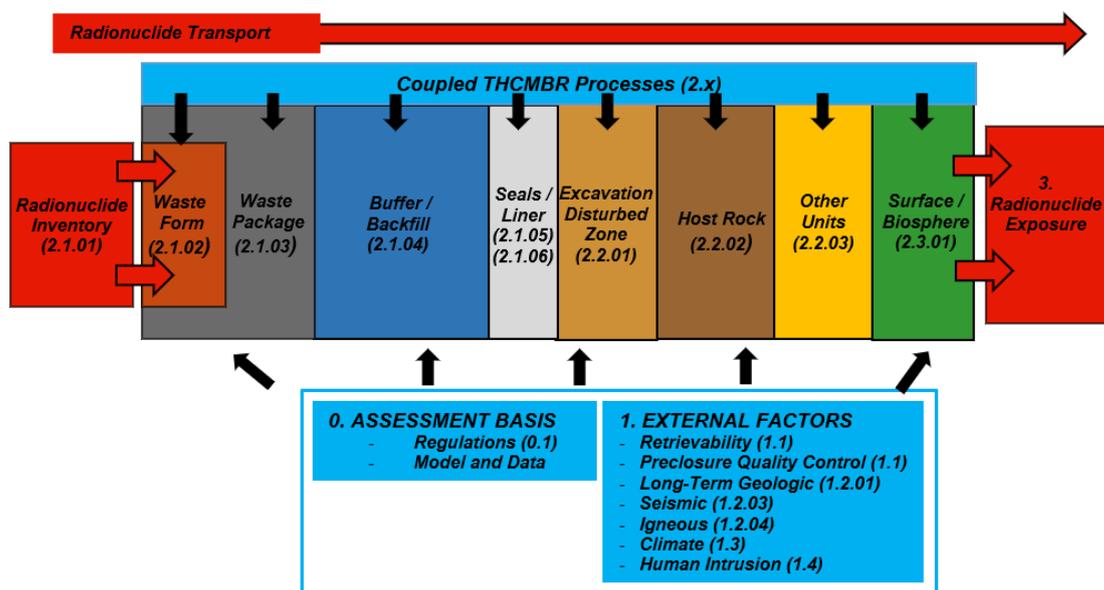


**Abb. 3.1** Ablauf der Relevanzprüfung und Priorisierung

### 3.1 Komponentenspezifische Prüfung

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

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

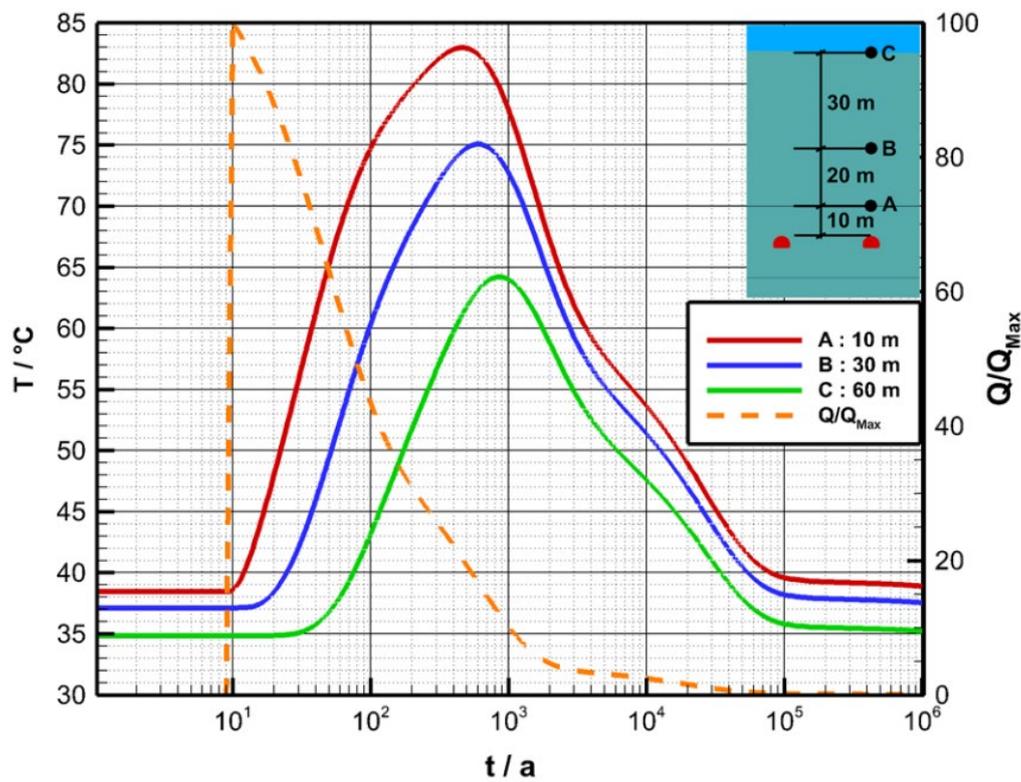
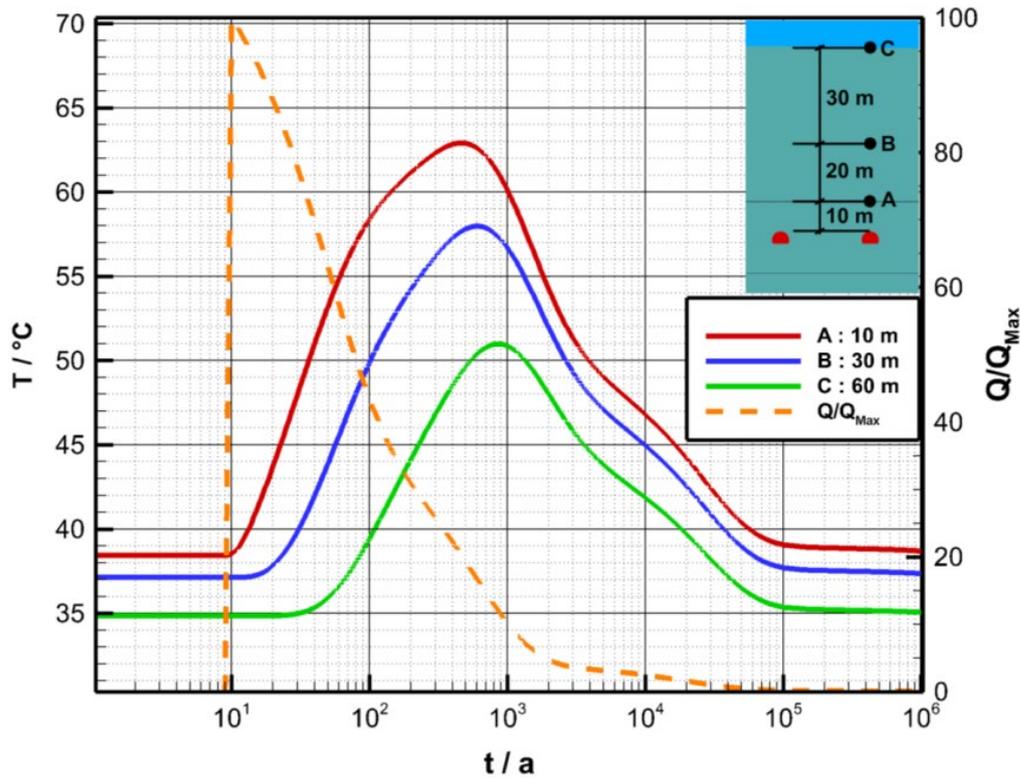


**Abb. 3.2** Komponenten und einwirkende Prozesse in einem Endlagersystem /FRE 20/

Berechnungen zur Wärmeausbreitung in Tongesteinsformationen geringer Mächtigkeit wurden z.B. in /ALF 20a/ und /ALF 20b/ durchgeführt (Abb. 3.3). Diese Berechnungen decken im Detail nicht die Verhältnisse im direkten Umfeld der Behälter (<10 m) ab und können auch im Fernfeld nicht 1:1 auf alle Tongesteinsformationen übertragen werden. Sie zeigen jedoch, dass

- die signifikante Abweichung von der ursprünglichen Temperatur im ungestörten Wirtsgestein im ELS nach ca. 1.000 Jahren abnimmt und nach ca. 20.000 bis 30.000 Jahren dem ursprünglichen Temperaturgradienten innerhalb des ewG entspricht;

- eine Erhöhung der Auslegungstemperatur von 100 °C (Abb. 3.3, oben) auf 150 °C (Abb. 3.3, unten) noch in 60 m Entfernung von den Abfällen eine Erhöhung des Temperaturmaximums von etwa 15 °C mit sich bringt;
- mit zunehmenden Abständen zu den Abfällen das Maximum deutlich niedriger ausfällt und damit auch die Unterschiede zwischen Auslegungstemperaturen von 100 °C und 150 °C deutlich geringer ausfallen.



**Abb. 3.3** Zeitliche Entwicklung der Temperatur an ausgewählten Bereichen im ELS in Tongesteinsformationen, oben: Auslegungstemperatur  $100\text{ }^\circ\text{C}$  /ALF 20a/, unten: Auslegungstemperatur  $150\text{ }^\circ\text{C}$  /ALF 20b/

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

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

Komponente	Bezeichnung in FEP-Matrix	ID in FEP-Matrix
Behälter	Waste Package	WP.00
Versatz	Buffer/Backfill	BB.00 BB.01
Streckenausbau	Mine Workings	MW.00
Auflockerungszone (ALZ)	Excavation Damaged Zone (EDZ)	HR.01
Wirtsgestein (insb. konturnaher ewG)	Emplacement Unit(s)	HR.02

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

Im hier betrachteten Einlagerungskonzept sind keine Verschlüsse im Einlagerungsbereich vorgesehen (Kapitel 2.1), so dass die Komponente (SP.01, SP.03) für die weitere Analyse entfällt. Darüber hinaus wurden die Komponenten MW.01 bis MW.04 ebenfalls nicht betrachtet.

### 3.2 Prozessgruppenspezifische Prüfung

Die prozessgruppenspezifische Prüfung beabsichtigt festzustellen, ob eine Prozessgruppe temperaturabhängig ist bzw. die Eigenschaften einer ELS-Komponente, einschließlich die ihrer Bestandteile, temperaturabhängig sind. Dieser Ansatz wurde

ausgeweitet, um auf der Ebene der assoziierten Prozesse komponentenunspezifisch deren Temperaturabhängigkeit festzustellen.

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

- TL: Thermische Prozesse
- TM: Thermo-mechanische Prozesse
- TH: Thermo-hydraulische Prozesse
- TC: Thermo-chemische Prozesse
- TB: Thermo-biologische Prozesse
- TT: Transportprozesse
- RA: Radiologische Prozesse<sup>3</sup>

Folgende Prozessgruppen aus /FRE 20/ werden nicht ausgewertet:

- Langzeitliche **geologische Prozesse** (LG): Die relevante Wärmeentwicklung durch hochradioaktive Abfälle liegt in der Größenordnung von ca. 30.000 Jahren. Langzeitlich wirkende geologische Prozesse (z.B. Hebung/Senkung des Standorts) wirken sich in diesem geologisch gesehen kurzen Zeitraum nicht aus, so dass sie für die Ableitung einer günstigen geologischen Temperatur keine Rolle spielen sollten.
- **Klimatische Prozesse** (CL): Die relevante Wärmeentwicklung durch hochradioaktive Abfälle liegt in der Größenordnung von ca. 30.000 Jahren. Klimatische Prozesse (z.B. glaziale Erosion/Rinnenbildung) werden aber erst mit Einsetzen der nächsten Kaltzeit (frühestens in 50.000 Jahren erwartet /GAN 16/) wirksam werden, so dass sie für die Ableitung einer günstigen geologischen Temperatur keine Rolle spielen sollten.

---

<sup>3</sup> Radiologischen Prozesse sind keine thermischen Prozesse, können jedoch mit diesen Prozessen gekoppelt sein.

- **Zukünftige menschliche Aktivitäten** (HP, HE): Zukünftige menschliche Aktivitäten, die im Zusammenhang mit dem ELS stehen, können aus heutiger Sicht nicht zuverlässig prognostiziert werden. Für die Ableitung einer optimalen Temperatur werden diese nicht berücksichtigt.
- **Sich selbst tragende Kettenreaktion** (NC): Den nationalen Regularien gemäß sind sich selbst tragende Kettenreaktionen auszuschließen (EndlSiAnfV § 8). Somit kommt dieser Prozessgruppe für die Ableitung einer günstigen geologischen Temperatur keine Relevanz zu.
- **Seismische Ereignisse** (SM): Im deutschen Auswahlverfahren sind größere seismische Ereignisse auszuschließen. Ein Ausschluss aufgrund der heutigen Beobachtungslage ist zwar kein abschließender Beweis für das Auftreten stärkerer Ereignisse in den nächsten eine Million Jahren. Dennoch kann unterstellt werden, dass ein stärkeres seismisches Ereignis eine sehr niedrige Eintrittserwartung hat. Der Einfluss der Temperatur auf seismische Ereignisse ist zusätzlich als gering einzustufen.
- **Magmatische Ereignisse** (IG): Im deutschen Auswahlverfahren sind größere magmatische Ereignisse auszuschließen. Auf Grund der geologischen Randbedingungen ist dies in Deutschland für die in Frage kommenden Regionen auch in den nächsten eine Million Jahren als gegeben anzusehen.
- **Frühes Versagen** (EF): Ein mögliches frühes Versagen von Barrieren resultiert vor allem durch menschliche Fehler / begrenzte Detektion bei der Fertigung technischer oder geotechnischer Barrieren. Der Einfluss der Temperatur auf solche Ereignisse ist grundsätzlich als gering einzustufen.

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

- eine Randbedingung der Untersuchung darstellt (z.B. Abfallinventar; Kategorie „Berücksichtigt“)

- externen Faktoren unterliegt (z.B. Klima, menschliches Eindringen, Kategorie „Nicht berücksichtigt“)

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

### **3.3 Einlagerungskonzeptspezifische Prüfung**

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

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

### **3.4 Prozessspezifische Prüfung**

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

Im Gegensatz zu der prozessgruppenspezifischen Prüfung berücksichtigt die prozessspezifische Prüfung das zugrunde gelegte Einlagerungskonzept, insbesondere die

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



## 4 Priorisierung

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

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

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



## 5 Ableitung von TUF

Allen assoziierten Prozessen, die im Rahmen der Priorisierung als temperaturabhängig und bedeutsam für die Festlegung einer günstigen Temperatur einer Komponente eingestuft wurden, werden primäre TUF zugewiesen. Diese TUF werden in Kap. 5.1 dargestellt. Eine ausführliche Erläuterung zu den dahinterstehenden Prozessen ist /BRA 19/ zu entnehmen. Im Anschluss wird für die Bilanzierungsgrößen Porosität, Lösungsmenge, Gasmenge und H<sub>2</sub>S-Menge die Beiträge verschiedener primärer TUF bestimmt (Kap. 5.2). Darauffolgend werden abgeleitete TUF generiert (Kap. 5.3). Diese leiten sich aus den primären TUF und den Bilanzierungsgrößen ab, beispielsweise durch Multiplikation. Hier findet auch eine Skalierung des Wertebereichs [0,1] statt. Ausschließlich die in Kap. 5.3 abgeleiteten TUF finden dann Verwendung für die Bestimmung der GTUF der verschiedenen Komponenten.

### 5.1 Primäre TUF

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

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

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

Einem Prozess können mehr als eine primäre TUF zugeordnet werden. Beispielsweise können dem Prozess „Flächenhafte Korrosion“ hinsichtlich der integritätsrelevanten Eigenschaften der Komponente WP.00 (Behälter) die primären TUF „Korrosionsrate“ und „Korrosionsrate durch H<sub>2</sub>S“, zugeordnet werden, weil die Temperaturabhängigkeit der Rate bzw. der Ausprägung dieses Prozesses durch bekannte Korrosionsraten aufgrund der Wechselwirkungen mit H<sub>2</sub>S und/oder Wasser abgebildet werden kann. Die mit der Korrosion einhergehende Bildung von H<sub>2</sub> und der Wasserverbrauch werden nicht als primäre TUF betrachtet, weil ihre Raten mit den entsprechenden Korrosionsraten gleichgesetzt werden und somit von letzteren nicht unabhängig sind.

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

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

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

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

Die folgende Tabelle (Tab. 5.1) listet die für das Wirtsgestein Tongestein identifizierten primären TUF zusammen mit den durch sie abgebildeten Prozessen auf.

**Tab. 5.1** Primäre TUF für das Wirtsgestein Tongestein

<b>Primäre TUF</b>	<b>Komponente</b>	<b>Beitragende Prozesse</b>
<i>integritätsrelevante TUF</i>		
Quellen	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01.TM.04 A Spannungsänderung durch Quellen von Tonmineralen HR.01/HR.02.TM.05 B Spannungsänderung durch Quellen von Tonmineralen
Konsolidierung	HR.01/ HR.02	HR.01./HR.02.TM.06 A/C Konsolidierung
Smektit-Illitisierung	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 A Alteration von Mineralen BB.01.TM.04 B Smektit-Illitisierung und andere Mineralumwandlungen HR.01/HR.02.TM.05 C Spannungsänderung durch Mineralumwandlung
Wasserdampfeinwirkung	BB.01	BB.01.TC.02 I Wasserdampfeinwirkung auf Bentonit
Quarzzementation	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 J/G Quarzzementation
Mikrobielle Eisenreduktion	BB.01/ HR.01/ HR.02/ MW.00	BB.01/HR.01/HR.02.TB.01 L Sulfatreduktion BB.01/HR.01/HR.02.TB.01 M Eisenreduktion MW.00.TB.01 M Eisenreduktion
Karbonatersetzung	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01.TC.02 K Zersetzung von Karbonatmineralen
Mineralumwandlung	BB.01/ HR.01/ HR.02/ MW.00	BB.01/HR.01/ MW.00.TC.01 H Lösungsinteraktion mit Behälter und Ausbau BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 C Mineralauflösung und -auslaugung

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01.TC.02 F Alteration von Mineralen aufgrund des durch die Radiolyse veränderten Lösungsschemismus BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 L/I Alteration und Neubildung von Mineralen BB.01/HR.01/HR.02 M/J H <sub>2</sub> -induzierte Pyrit-Reduktion BB.01/HR.01/HR.02.TC.01 M/L Thermochemische Sulfatreduktion BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 B/D Redoxprozesse BB.01.TC.02 F Alteration von Mineralen aufgrund des durch die Radiolyse veränderten Lösungsschemismus
Lösungsdruck	BB.01/ HR.01/ HR.02/ MW.00	BB.01/HR.01/HR.02.TH.01 A Druckgetriebene Strömung (Lösung) BB.01/HR.01.TH.01 B Druckgetriebene Strömung (Gas) BB.01/HR.01.TH.01 D Druckgetriebene Strömung zwischen Kluft und Matrix BB.01/HR.01.TM.04 C/TM.05 A Spannungsänderung durch Lösungsdruck MW.00.TM.05 A Lösungsdruck (intern) MW.00.TM.05 B Lösungsdruck (extern)
Gasdruck	BB.01/ HR.01/ MW.00	BB.01/HR.01.TH.01 A Druckgetriebene Strömung (Lösung) BB.01/HR.01/MW.00.TH.01 B Druckgetriebene Strömung (Gas) BB.01/HR.01.TH.01 D Druckgetriebene Strömung zwischen Kluft und Matrix BB.01/HR.01/MW.00.TM.04 D/A Spannungsänderung durch Gasdruck MW.00.TM.04 B Gasdruck (extern)

<b>Primäre TUF</b>	<b>Komponente</b>	<b>Beitragende Prozesse</b>
Thermochemische Sulfatreduktion	BB.01/ HR.01/ HR.02/ MW.00	BB.01/HR.01/HR.02/MW.00.TC.01 M/L Thermochemische Sulfatreduktion
Mikrobielle Sulfatreduktion	BB.01/ HR.01/ HR.02/ MW.00	BB.01/HR.01/HR.02/MW.00.TB.01 H Mikrobielle Gasbildung BB.01/HR.01/HR.02/MW.00.TB.01 L Sulfatreduktion
Methanogenese	BB.01/ HR.01/ HR.02/ MW.00	BB.01/HR.01/HR.02/MW.00.TB.01 H Mikrobielle Gasbildung BB.01/HR.01/HR.02/MW.00.TB.01 K Methanogenese
Fermentation	BB.01/ HR.01/ HR.02/ MW.00	BB.01/HR.01/HR.02/MW.00.TB.01 H Mikrobielle Gasbildung BB.01/HR.01/HR.02/MW.00.TB.01 O Fermentation
Mechanisch induzierte H <sub>2</sub> -Bildung	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 G/E Bildung von H <sub>2</sub> in gebrochenen Silikatkörnern
Pyrolyse	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TC.03 C/D Pyrolyse des Kerogens
Thermolabile Organika	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TC.03 B/C Pyrolyse des Kerogens
CO <sub>2</sub> -Desorption	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TC.03 D/E Pyrolyse des Kerogens
H <sub>2</sub> -induzierte Pyrit-Reduktion	BB.01/ HR.01	BB.01/HR.01.TC.02 M H <sub>2</sub> -induzierte Pyrit-Reduktion
Karbonatisierung	MW.00	MW.00.TC.04 A Betonkorrosion

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
Betonkorrosion	MW.00	MW.00.TC.04 A Betonkorrosion
Rissbildung im Beton	MW.00	MW.00.TC.04 D Thermochemische Rissbildung MW.00.TM.06 C Thermomechanische Rissbildung
Korrosionsrate	WP.00/ BB.01/ HR.01	BB.01/HR.01/MW.00.TC.01 H Lösungsinteraktion mit Behälter und ggf. verbleibenden Metallteilen BB.01/HR.01/MW.00.TC.01 I Lösungsinteraktion mit Korrosionsprodukten des Behälters MW.00.TC.03 A Metallkorrosion WP.00.TC.02 A Gasbildung aus der anaeroben Metallkorrosion WP.00.TC.03 C Flächenhafte Korrosion WP.00.TC.03 D Bildung und Stabilität der Passivierungsschicht WP.00.TC.04 A/B, WP.00.TC.05 A/B, WP.00.TC.08 A Lokale Korrosionsprozesse*
Korrosionsrate durch H <sub>2</sub> S	WP.00/ BB.01/ HR.01	BB.01/ HR.01.TC.01 H Lösungsinteraktion mit Behälter und ggf. verbleibenden Metallteilen BB.01.TC.01 I Lösungsinteraktion mit Korrosionsprodukten des Behälters WP.00.TC.02 A Gasbildung aus der anaeroben Metallkorrosion WP.00.TC.03 C Flächenhafte Korrosion WP.00.TC.03 D Bildung und Stabilität der Passivierungsschicht WP.00.TC.04 A/B, WP.00.TC.05 A/B, WP.00.TC.08 A Lokale Korrosionsprozesse*
Versprödungsrate	WP.00	WP.00.RA.02 A Versprödung des Behälters durch Strahlung WP.00.TC.06 A/B/C Wasserstoff-Versprödung

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		WP.00.TM.02 C Versprödung des Behälters durch lokale Korrosion
<b><i>RN-transportrelevante TUF</i></b>		
Viskosität	BB.01/ HR.01/ HR.02/ MW.00	BB.01./HR.01./MW.00.TC.01 H Lösungsinteraktion mit Behälter und Ausbau BB.01. /HR.01. /MW.00.TC.01 I Lösungsinteraktion mit Korrosionsprodukten des Behälters und Ausbaus BB.01./HR.01./MW.00.TH.03 A Freie Konvektion BB.01/HR.01.TH.07 C Dichte- und Viskositätsänderungen der Fluide BB.01/HR.01./HR.02./MW.00.TT.01 A Advektion (Lösung) BB.01/HR.01./HR.02/MW.00.TT.01 B Dispersion (Lösung) BB.01./HR.01./HR.02/MW.00.TT.01 C Diffusion (Lösung) BB.01/HR.01./HR.02/MW.00.TT.01 D Matrixdiffusion BB.01/HR.01./MW.00.TT.04 C RN-Transport durch Konvektion BB.01/HR.01./MW.00.TT.05 A Advektion (Gas) BB.01/HR.01/MW.00.TT.05 B Diffusion (Gas) MW.00.TC.03 A Metallkorrosion MW.00.TC.03 B Auflösung und Auslaugung MW.00.03. B Infiltration, Abfluss MW.00.TH.07 C Thermische Dichteänderung
Dichte	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01./HR.02./MW.00.TC.01 C Auflösung BB.01./HR.01./HR.02./MW.00.TC.01 D Ausfällung

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		<p>BB.01./HR.01./MW.00.TC.01 H Lösungsinteraktion mit Behälter und Ausbau</p> <p>BB.01./HR.01./MW.00.TC.01 I Lösungsinteraktion mit Korrosionsprodukten des Behälters und Ausbaus</p> <p>BB.01./HR.01./MW.00.TC.01 J Lösungsinteraktion mit eindringenden Lösungen aus anderen Komponenten</p> <p>BB.01./MW.00.TC.01 L Osmotische Bindungen</p> <p>BB.01./HR.01./MW.00.TH.03 A Freie Konvektion</p> <p>BB.01./HR.01./HR.02.TH.07 C Dichte- und Viskositätsänderungen der Fluide</p> <p>BB.01./HR.01./HR.02./MW.00.TT.01 A Advektion (Lösung)</p> <p>BB.01./HR.01./HR.02./MW.00.TT.01 B Dispersion (Lösung)</p> <p>BB.01./HR.01./HR.02./MW.00.TT.01 C Diffusion (Lösung)</p> <p>BB.01./HR.01./HR.02./MW.00.TT.01 D Matrixdiffusion</p> <p>BB.01./HR.01./MW.00.TT.04 C RN-Transport durch Konvektion</p> <p>BB.01./HR.01./MW.00.TT.05 A Advektion (Gas)</p> <p>BB.01./HR.01./MW.00.TT.05 B Diffusion (Gas)</p> <p>MW.00.TC.02. D</p> <p>MW.00.T.03 A Metallkorrosion</p> <p>MW.00.TC.04 C Auflösung und Ausfällung</p> <p>MW.00.TH.07 C Thermische Dichteänderung</p> <p>MW.00.TH.07 E Dehydratisierung (als Teilprozess der thermischen Zersetzung)</p>

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
Rückhaltung	BB.01/ HR.01/ HR.02	<p>MW.00.TB.01 A Mikrobielle Korrosion</p> <p>BB.01/HR.01./HR.02./MW.00.TB.01 D Biofilmbildung</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02/MW.00.TB.01 F Aufbau von Biomasse</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02/MW.00.TB.01 G Mikrobielle Bioakkumulation</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02/MW.00.TB.01 L Sulfatreduktion</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02/MW.00.TB.01 M Eisenreduktion</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TC.01 B Redoxprozesse</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TC.01 E Kolloidbildung und -filtration</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 A Alteration von Mineralen</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 C Mineralauflösung und -auslaugung</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 L/I Alteration und Neubildung von Mineralen</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 B/D Redoxprozesse</p> <p>BB.01.TC.02 F Alteration von Mineralen aufgrund des durch die Radiolyse veränderten Lösungsschemismus</p> <p>MW.00. TC.04 A Alteration von Mineralen aufgrund des durch die Radiolyse veränderten Lösungsschemismus</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.02 A Physisorption (immobiler Phasen)</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.02 B Oberflächenkomplexierung</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.02 C Ionenaustausch (mit stationären Phasen)</p> <p>BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.03 A Physisorption (mobiler Phasen)</p>

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.03 C Ionenaustausch (mit mobilen Phasen) BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.03 E Chemosorption BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.06 A Bildung von Eigenkolloiden BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.06 B Bildung von Fremdkolloiden BB.01/HR.01/HR.02.TT.06 C Sorption an Kolloiden BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.07 E Kolloidstabilität BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.07 F Filtration (Kolloide) BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.08 A Kolloidfiltration BB.01/HR.01/MW.00.TT.08 B Gas-/ Lösungsgrenzflächensorption
Diffusionskoeffizient	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.00./HR.01./MW.00.RA.01 C Veränderung der Lösungsschemie durch Radiolyse MW.00.TB.01 A Mikrobielle Korrosion BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TB.01 B Mikrobielle Komplexbildung BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TB.01 C Mikrobielle Kolloidbildung BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TB.01 E Biodegradation BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TC.01 A Speziation BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TC.01 B Redoxprozesse BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 L/I Alteration und Neubildung von Mineralen BB.01/HR.01.TC.02 M H <sub>2</sub> -induzierte Pyrit-Reduktion BB.01/HR.01/MW.00.TH.05 A Diffusion der Dampfphase BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TH.05 B Diffusion des gelösten Gases

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01.TH.06 C Schwellenwertfluss BB.01/HR.01/HR.02.TT.01 E Komplexbildung BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.01 F Isotopische Verdünnung BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.03 B Wechselwirkungen mit organischen Komplexbildnern
RN-Konzentration	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.00./HR.01./MW.00. RA.01 C Veränderung des Lösungsschemismus durch Radiolyse BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TC.01 B Redoxprozesse BB.01./HR.01./HR.02./MW.00.TC.01 E Kolloidbildung und -filtration BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TC.01 F Änderung der chemischen Zusammensetzung durch Sorption BB.01/HR.01/HR.02.TC.01 G Löslichkeit (RN und andere Spezies) BB.01/MW.00.TC.01 L Osmotische Bindungen BB.01./HR.01/HR.02.TC.02 K/H Zersetzung von Karbonatmineralen BB.01/HR.01./HR.02./MW.00.TH.03 B Infiltration, Abfluss BB.00./HR.01./MW.00.TH.04 A Dünnschichtfluss BB.01/HR.01/HR.02.TH.04 C Immobilisierung der Porenwässer MW.00.TH.07 D Matrixdiffusion (Kolloide) BB.01/HR.01./HR.02/MW.00.TT.01 A Advektion (Lösung) BB.01/HR.01./HR.02/MW.00.TT.01 B Dispersion (Lösung) BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.01 C Diffusion (Lösung) BB.01./HR.01./HR.02./MW.00.TT.01 D Matrixdiffusion

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.01 H Löslichkeit (von RN und anderen Spezies) BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.02 D Ausfällung/ Auflösung (mit immobilen Phasen) BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.03 D Ausfällung/ Auflösung BB.01/HR.01./MW.00.TT.04 C RN-Transport durch Konvektion BB.01/HR.01./MW.00.TT.05 A Advektion (Gas) BB.01/HR.01/MW.00.TT.05 B Diffusion (Gas) BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.06 A Bildung von Eigenkolloiden BB.01/HR.01./HR.02./MW.00.TT.07 A Advektion (Kolloide) BB.01/HR.01./HR.02/MW.00.TT.07 B Dispersion (Kolloide) BB.01/HR.01/HR.02./MW.00.TT.07 C Diffusion (Kolloide)
Thermische Osmose	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TT.04 B RN-Transport durch thermische Osmose

\* zusammenfassende Bezeichnung für verschiedene Einzelprozesse zur lokalen Korrosion

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

### 5.1.1 Quellen

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

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

$k$  [m<sup>2</sup>]: Temperaturabhängige Permeabilität

$k_0$  [m<sup>2</sup>]: Permeabilität bei 35 °C

$\phi$  [-]: Temperaturabhängige Porosität

$\phi_0$  [-]: Porosität bei 35 °C

in Porositäten umgerechnet. Die zugehörigen polynomiellen Fit-Funktionen:

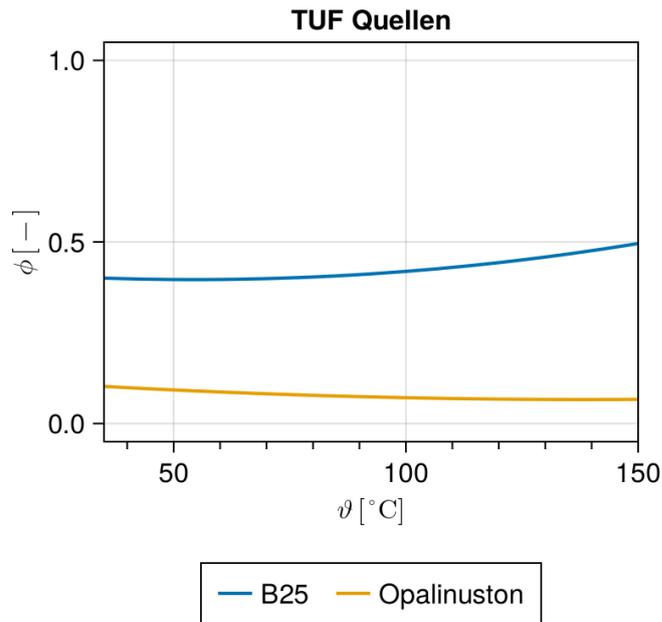
$$\begin{aligned} \phi_{B25}(\vartheta) &= 1,08637 \cdot 10^{-5} \left(\frac{\vartheta}{^\circ\text{C}}\right)^2 - 0,001181716 \left(\frac{\vartheta}{^\circ\text{C}}\right) + 0,428450317 \\ \phi_{OPA}(\vartheta) &= 3,35838 \cdot 10^{-6} \left(\frac{\vartheta}{^\circ\text{C}}\right)^2 - 0,000931369 \left(\frac{\vartheta}{^\circ\text{C}}\right) + 0,130646465 \end{aligned} \quad (5.2)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$\phi_{B25}$  [-]: temperaturabhängige Porosität für B25

$\phi_{OPA}$  [-]: temperaturabhängige Porosität für Opalinuston

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



**Abb. 5.1** Temperaturabhängige Porositätsverläufe errechnet aus den in /MEL 23/ experimentell bestimmten Permeabilitäten für B25 und Opalinuston

### 5.1.2 Konsolidierung

Konsolidierung bezieht sich auf den Prozess der Spannungsumlagerung von dem Porenwasser auf das Korngerüst eines Gesteins unter Reduktion des Gesamtvolumens (einschließlich der Reduktion des Porenvolumens und der Expulsion des Porenwassers, siehe hierzu z. B. Unterkapitel A.6 in /BRA 19/). Bei Erhöhung der Temperatur zeigen Tonsteine entweder kontraktives Verhalten oder expansives-kontraktives Verhalten /SUL 02/. Es kann allerdings kein allgemeiner Trend angegeben werden, ob sich ein Tonstein eher kontraktiv oder eher expansiv-kontraktiv verhält. Beide Verhaltensformen führen zu irreversiblen Verformungen, die sich auf die Porosität auswirken können. Neben dem Spannungszustand bestimmen die Tonmineralart und der Tonmineralanteil in dem Tonstein das Verhalten substantziell. Auch haben die Drainagebedingungen einen großen Einfluss auf das Verhalten, da sie die Porenwasserexpulsion bzw. Porendruckaufbau bestimmen. Darüber hinaus ist die Schichtung relevant, insbesondere für die Drainagebedingungen. Um die Anwendung des vorgeschlagenen Ansatzes aufzuzeigen, wird die TUF „Konsolidierung“ hier dennoch beispielhaft anhand der In-situ-Ergebnisse für Opalinuston /JOB 07/ aufgestellt (Abb. 5.2). Die TUF repräsentiert dabei die volumetrische Deformation, welche als das Dreifache der in Abb. 5.2 dargestellten, uniaxialen Dehnung angenommen wird. Für 35 °C wird ein Wert von 0,09 % angesetzt, der

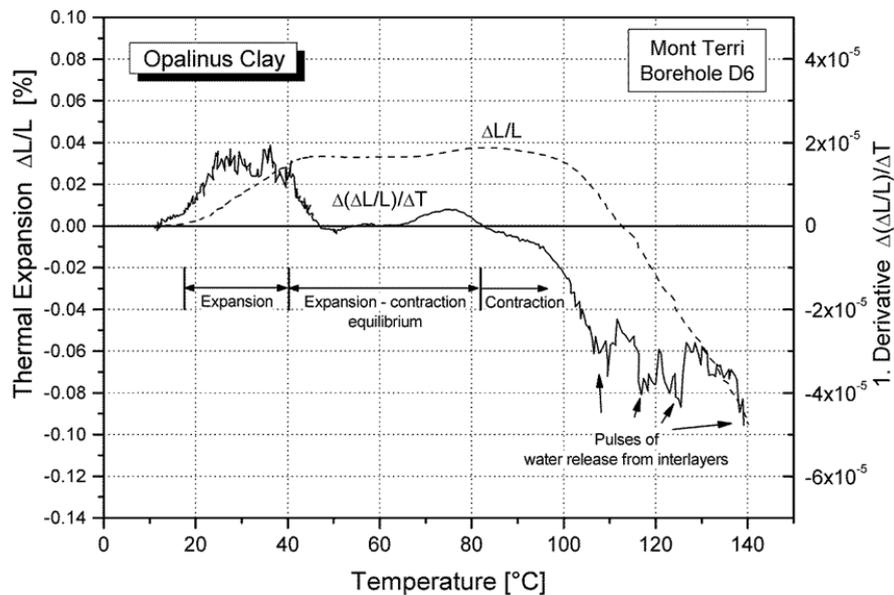
bis 90 °C quadratisch auf 0,12 % ansteigt und zwischen 90 °C und 112 °C quadratisch bis auf 0 abfällt. Oberhalb von 112 °C wird der Verlauf in Abb. 5.2 linear approximiert und zwischen 140 °C und 250 °C linear extrapoliert mit einem Endwert von -1,5 %. Daraus ergibt sich die Funktion

$$k_{\text{Konsol}}(\vartheta) = \begin{cases} 0,0012 - 0,0003 \cdot \left(\frac{\vartheta - 90 \text{ °C}}{35 \text{ °C} - 90 \text{ °C}}\right)^2 & 35 \text{ °C} \leq \vartheta < 90 \text{ °C}, \\ 0,0012 \cdot \left(1 - \left(\frac{\vartheta - 90 \text{ °C}}{112 \text{ °C} - 90 \text{ °C}}\right)^2\right) & 90 \text{ °C} \leq \vartheta < 112 \text{ °C}, \\ -0,015 \cdot \frac{\vartheta - 112 \text{ °C}}{250 \text{ °C} - 112 \text{ °C}} & 112 \text{ °C} \leq \vartheta \leq 250 \text{ °C}. \end{cases} \quad (5.3)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$k_{\text{Konsol}}$  [-]: TUF der Konsolidierung für Opalinuston

Wie auch bei der mathematischen Beschreibung von anderen standortspezifischen TUF (siehe Tab. 5.2) ist bei dieser TUF darauf zu achten, dass ihre mathematische Beschreibung hinsichtlich der genauen Temperatur des Expansion-Kontraktion-Überganges, falls vorhanden, erst im Standortauswahlverfahren ermittelt werden kann.



**Abb. 5.2** Expansion, Kontraktion und Wasserfreisetzung im Opalinuston als eine Funktion der Temperatur (vereinfacht nach /JOB 07/)

### 5.1.3 Smektit-Illitisierung

Smektite und Illite sind zwei Tonmineralgruppen mit unterschiedlichen Eigenschaften. Smektite zeichnen sich gegenüber Illiten durch eine höhere Kationenaustauschkapazität

und Quellfähigkeit aus. Mit steigender Temperatur werden Smektitte zunehmend in Illite umgewandelt, sodass die günstigen Eigenschaften von Ton und Bentonit mit erhöhter Temperatur verloren gehen können. Die TUF „Smektit-Illitisierung“ basiert auf dem in /ŠUC 93/ gemessenen, temperaturabhängigen Smektit-Anteil in Smektit-Illit-Wechsellaagerungen einer Bentonit- und einer Tonsteinformation. Die in Abb. 5.3 dargestellten Messdaten werden dazu durch die beiden Fit-Funktionen

$$k_{SI,Bentonit}(\vartheta) \propto \arctan\left(\frac{\vartheta - 110\text{ °C}}{30\text{ °C}}\right) \quad (5.4)$$

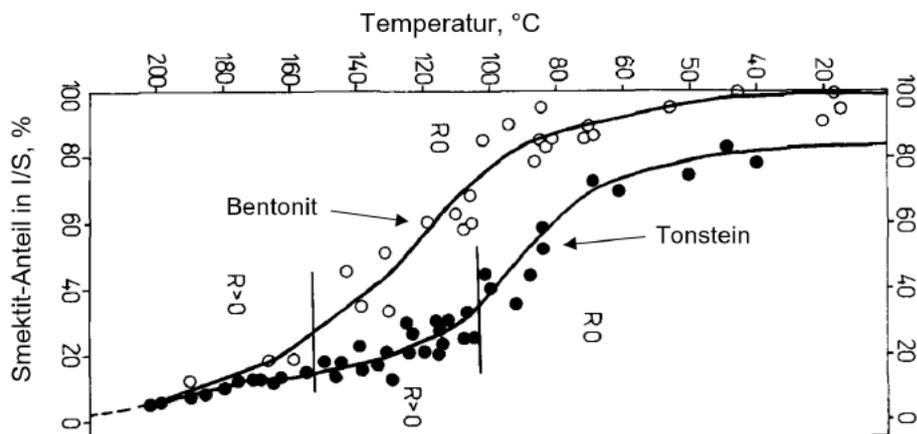
$$k_{SI,Ton}(\vartheta) \propto \arctan\left(\frac{\vartheta - 85\text{ °C}}{30\text{ °C}}\right)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

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

$k_{SI,Ton}$  [-]: TUF der Smektit-Illitisierung für Tonstein

repräsentiert.



**Abb. 5.3** Smektit-Anteil der Smektit-Illit-Wechsellaagerung einer Bentonit-Formation bzw. eines Tongesteins in Abhängigkeit von der Temperatur /ŠUC 93/

#### 5.1.4 Wasserdampfeinwirkung

Die TUF „Wasserdampfeinwirkung“ berücksichtigt die starke Reduzierung der osmotischen Quellfähigkeit von Bentoniten durch die Wechselwirkung mit Wasserdampf bei erhöhten Temperaturen /COU 85/, /OSC 89/, /CUE 01/, /HEU 14/. Dieser Effekt wird durch einen partiellen oder vollständigen Verlust des Hydratationswassers der

austauschbaren Kationen an Tonmineraloberflächen oberhalb von 150 °C erklärt /OUH 10/. Daher wird die Temperaturabhängigkeit durch eine Sprungfunktion bei 150 °C

$$k_{WD}(\vartheta) = \begin{cases} 0, & 35 \text{ °C} \leq \vartheta < 150 \text{ °C} \\ 1, & 150 \text{ °C} \leq \vartheta < 250 \text{ °C} \end{cases} \quad (5.5)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

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

abgebildet.

### 5.1.5 Quarzzementation

Im Temperaturbereich 60 – 80 °C fällt das bei der Illitisierung freigesetzte Siliziumoxid zu mikrokristallinem Quarz aus. Ab Temperaturen von ca. 85 °C wird die Bildung von Quarzplättchen begünstigt /THY 11/. Bis ca. 130 °C überwiegen noch die Tonmineral-Tonmineral-Kornkontakte im Tongestein /GOU 16/. Bei Temperaturen über 150 °C kann nahezu kontinuierlicher Quarzzement beobachtet werden /THY 11/. Entsprechend sind Temperaturen bis 85 °C günstig. Danach steigt die TUF von 85 – 130 °C schwach und folgend bis 150 °C stark an. Dieser Trend wird durch die Funktion

$$k_{QZ}(\vartheta) = \begin{cases} 0, & 35 \text{ °C} \leq \vartheta < 85 \text{ °C} \\ \left( \frac{\vartheta - 85 \text{ °C}}{150 \text{ °C} - 85 \text{ °C}} \right)^4, & 85 \text{ °C} \leq \vartheta < 150 \text{ °C} \\ 1, & 150 \text{ °C} \leq \vartheta \leq 250 \text{ °C} \end{cases} \quad (5.6)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$k_{QZ}$  [-]: TUF der Quarzzementation

dargestellt.

### 5.1.6 Mikrobielle Eisenreduktion

In tonhaltigen Materialien können eine Vielzahl von Mikroorganismen unter anaeroben Bedingungen aktiv sein. Da hier die scharfe Temperaturgrenze entfällt, die bei hochspezialisierten halophilen Mikroben beobachtet werden kann, werden nachfolgend die Temperaturgrenzen der wesentlichen Stoffwechselwege (Sulfatreduzierung, Eisenreduktion, Methanogenese, Fermentation) dargestellt (Abb. 5.4). Die mikrobielle Reduktion von Fe(III), die im Ton von besonderer Bedeutung ist, resultiert in einer Reduktion der

Sorptionsfähigkeit. Die mikrobielle Aktivität von Eisenreduzieren nimmt mit der steigenden Temperatur bis ca. 130 °C /KAS 03/, /KAS 08/ stark nichtlinear ab. Zwar konnte bei 130 °C durch /KAS 03/ kein Wachstum der Mikroben beobachtet werden, jedoch setzte dieser bei Umsiedlung in ein Medium mit 103 °C erneut ein. Ein aktiver Metabolismus kann daher auch bei 130 °C unterstellt werden. Aufgrund der Wachstumshemmung wird die mikrobielle Aktivität bei dieser Temperatur jedoch zeitlich begrenzt sein, weshalb darüber hinaus keine mikrobielle Aktivität dieser Spezies zu erwarten ist. Für die TUF wird der Verlauf entsprechend einer (invertierten) Normalverteilungsfunktion mit Mittelwert  $\mu = 95$  und Standardabweichung  $\sigma = 12$

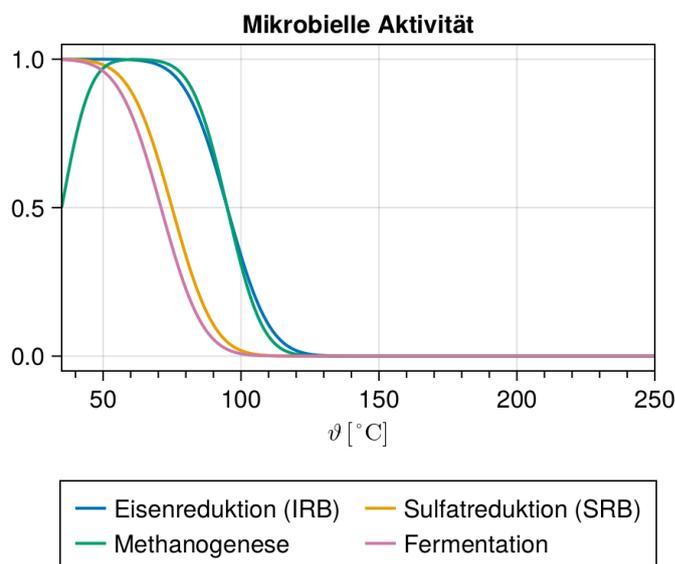
$$k_{\text{IRB}}(\vartheta) = 1 - \left( 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{\vartheta - 95 \text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 12 \text{ °C}} \right) \right) / 2. \quad (5.7)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

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

erf: Gaußsche Fehlerfunktion

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



**Abb. 5.4** TUF zur mikrobiellen Aktivität

### 5.1.7 Mikrobielle Sulfatreduktion

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

$$k_{\text{SRB}}(\vartheta) = 1 - \left( 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\vartheta - 75 \text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 12 \text{ °C}}\right) \right) / 2 \quad (5.8)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

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

erf: Gaußsche Fehlerfunktion

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

### 5.1.8 Methanogenese

Methanogene Archaeen setzen u.a. CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub> zu CH<sub>4</sub> um /PAR 19/ und können zur Reduktion des Gasdrucks in einem Endlager beitragen. Die derzeit bekannte hitzeresistenteste Mikrobenart ist ein Methanogen, das unter einem In-situ-Druck von 20 MPa bis 122 °C wachsen und Methan produzieren kann /TAK 08/. Daher nimmt die TUF ab dieser Temperatur den Wert 0 an. Die Raten der Methanogenese steigen im Temperaturbereich von 0 bis ca. 60 °C exponentiell an /YVO 14/. Für die TUF wird bis 60 °C der Verlauf entsprechend einer Normalverteilungsfunktion mit Mittelwert  $\mu_1 = 35$  und Standardabweichung  $\sigma_1 = 8$  und oberhalb von 60 °C entsprechend einer (invertierten) Normalverteilungsfunktion mit Mittelwert  $\mu_2 = 95$  und Standardabweichung  $\sigma_2 = 9$

$$k_{\text{Meth}}(\vartheta) = \begin{cases} \left( 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\vartheta - 35 \text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 8 \text{ °C}}\right) \right) / 2 & 35 \text{ °C} \leq \vartheta < 60 \text{ °C} \\ 1 - \left( 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\vartheta - 95 \text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 9 \text{ °C}}\right) \right) / 2 & 60 \text{ °C} \leq \vartheta \leq 250 \text{ °C} \end{cases} \quad (5.9)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$k_{\text{Meth}}$  [-]: TUF der Methanogenese

erf: Gaußsche Fehlerfunktion

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

### 5.1.9 Fermentation

Bei der Fermentation werden organische Bestandteile ohne die Einbeziehung externer Elektronenakzeptoren wie Sauerstoff (O<sub>2</sub>) oder Sulfat (SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>) umgesetzt, d.h. sie sind nur von der Anwesenheit organischer Stoffe abhängig. Die Temperaturobergrenze, bis zu der diese Umsetzung erfolgt, liegt derzeit bei 104 °C /OH 03/. Für die TUF wird der Verlauf entsprechend einer (invertierten) Normalverteilungsfunktion mit Mittelwert  $\mu = 70$  und Standardabweichung  $\sigma = 12$

$$k_{\text{Ferment}}(\vartheta) = 1 - \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\vartheta - 70 \text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 12 \text{ °C}}\right)\right) / 2 \quad (5.10)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$k_{\text{Ferment}}$  [-]: TUF der Fermentation

erf: Gaußsche Fehlerfunktion

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

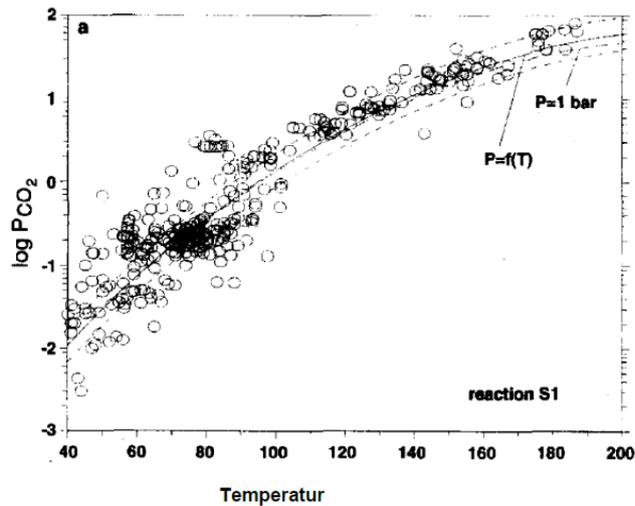
### 5.1.10 Karbonatzersetzung

Durch eine temperaturabhängige Reaktion von Tonmineralen und Karbonatmineralen in tonhaltigen Materialien kommt es zur Freisetzung von CO<sub>2</sub>. Diese Reaktion erhöht die Gasmenge im ELS. Die zugehörige TUF basiert auf dem temperaturabhängigen Anstieg des Partialdrucks von CO<sub>2</sub> in Sedimentgesteinen. Eine Parameteranpassung der Messdaten in /COU 98/ (Abb. 5.5) führt zu dem Zusammenhang

$$k_{\text{Karbo}}(\vartheta) \propto \exp\left(-8,33333 \cdot 10^{-5} \left(\frac{\vartheta}{\text{°C}}\right)^2 + 0,045 \left(\frac{\vartheta}{\text{°C}}\right) - 3,666666667\right). \quad (5.11)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$k_{\text{Karbo}}$  [-]: TUF der Karbonatzersetzung



**Abb. 5.5** Temperaturabhängigkeit des CO<sub>2</sub>-Partialdrucks in Sedimentformationen nach /COU 98/

### 5.1.11 Mineralumwandlung

Aufgrund der elementspezifischen Ausprägung der Temperaturabhängigkeit von Mineralumwandlungen ist die Formulierung einer entsprechenden TUF nur standortabhängig möglich. Daher wird diese TUF hier nur als Platzhalter genannt und kann ggf. zu einem späteren Zeitpunkt im Standortauswahlverfahren und bei Kenntnis der Standortspezifika ergänzt werden.

### 5.1.12 Thermochemische Sulfatreduktion

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

$$k_{\text{TSR}}(\vartheta) \propto \exp\left(\frac{-130 \cdot 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot (\vartheta + 273 \text{ °C})}\right) \quad (5.12)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

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

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

### 5.1.13 Lösungsdruck

Mit der TUF „Lösungsdruck“ wird die Erhöhung des Druckes von Lösung im ELS in Abhängigkeit von der Temperatur berücksichtigt. Der funktionale Zusammenhang basiert auf thermodynamischen Daten von Wasser nach der Formulierung IAPWS-95 der International Association for the Properties of Water and Steam /WAG 02/. Mithilfe des Python-Paketes `iapws /GOM 21/` und dem zugehörigen Modul `iapws.iapws95` wurde der Druck von flüssigem Wasser bei einer Dichte von  $1000 \text{ kg/m}^3$  im betrachteten Temperaturintervall berechnet. Fitting der Daten durch ein Polynom dritten Grades ergibt den Zusammenhang

$$\frac{p(\vartheta)}{\text{MPa}} = -1,22469 \cdot 10^{-5} \left(\frac{\vartheta}{^\circ\text{C}}\right)^3 + 0,00786794 \left(\frac{\vartheta}{^\circ\text{C}}\right)^2 - 0,475555206 \frac{\vartheta}{^\circ\text{C}} - 13,3122172. \quad (5.13)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

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

### 5.1.14 Gasdruck

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

$$p(\vartheta) \propto (\vartheta + 273^\circ\text{C}). \quad (5.14)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

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

### 5.1.15 Mechanisch induzierte H<sub>2</sub>-Bildung

Durch mechanische Einwirkung auf Silikatminerale, sei es durch die Katalase in der geologischen Vergangenheit, durch Auffahrung oder durch eine Zerkleinerung während der Aufbereitung des Versatzmaterials, entstehen infolge der Spaltung der Si-O-Si-Bindungen freie Si•-Radikale, die eine Reaktion mit Wassermolekülen eingehen und diese unter Bildung von H<sub>2</sub> spalten /STO 22/. Dieser Prozess ist bis ca. 90 °C wirksam, weil bei höheren Temperaturen die bei der mechanischen Einwirkung ebenfalls

entstehenden SiO•-Radikale aktiviert werden und H<sub>2</sub>-Bildung durch eine Reaktion mit Produkten der Wasserspaltung verhindern.

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

$$k_{mH_2}(\vartheta) \propto 7,30038 \cdot 10^{-8} \left(\frac{\vartheta}{\text{°C}}\right)^3 - 3,41797 \cdot 10^{-6} \left(\frac{\vartheta}{\text{°C}}\right)^2 + 3,14360 \cdot 10^{-4} \left(\frac{\vartheta}{\text{°C}}\right) - 2,32573 \cdot 10^{-3} \quad (5.15)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$k_{mH_2}$  [-]: TUF der mechanisch induzierten H<sub>2</sub>-Bildung

und nimmt für höhere Temperaturen den Wert 1 an.

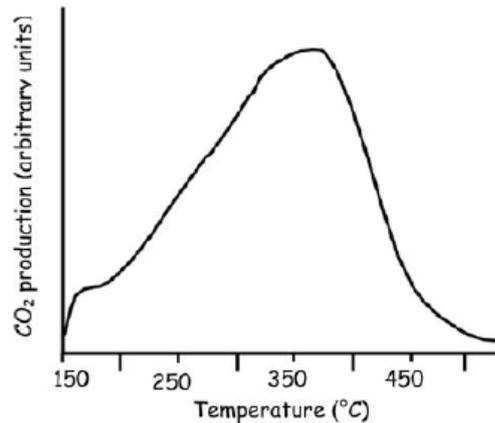
### 5.1.16 Pyrolyse

Die Pyrolyse des Kerogens führt oberhalb von 150 °C zur Freisetzung von CO<sub>2</sub> und trägt damit zur Gasmenge im ELS bei. Die TUF bildet den Kurvenverlauf der CO<sub>2</sub>-Produktion durch Pyrolyse in Abb. 5.6 nach. Zwischen 150 °C und 180 °C wird ein quadratischer Verlauf mit fallendem Anstieg bis auf null und einem maximalen Wert von 0,45 bei 180 °C und zwischen 180 °C und 250 °C wird ein quadratischer Verlauf mit steigendem Anstieg von null beginnend bis auf den Wert eins bei 250 °C angenommen. Es ergibt sich die Funktion

$$k_{\text{Pyro}}(\vartheta) = \begin{cases} 0, & 35 \text{ °C} \leq \vartheta < 150 \text{ °C} \\ 0,45 \cdot \left(1 - \left(\frac{\vartheta - 180 \text{ °C}}{150 \text{ °C} - 180 \text{ °C}}\right)^2\right), & 150 \text{ °C} \leq \vartheta < 180 \text{ °C} \\ 0,45 + 0,55 \cdot \left(1 - \left(\frac{\vartheta - 180 \text{ °C}}{250 \text{ °C} - 180 \text{ °C}}\right)^2\right) & 180 \text{ °C} \leq \vartheta \leq 250 \text{ °C} \end{cases} \quad (5.16)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$k_{\text{Pyro}}$  [-]: TUF der Pyrolyse



**Abb. 5.6** Temperaturabhängigkeit der CO<sub>2</sub>-Produktion durch Kerogenpyrolyse nach /BRU 12/

### 5.1.17 Thermolabile Organika

Durch Temperaturzunahme können an Organika gebundene Gase wie CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>S (thermolabile Phase) freigesetzt werden. Untersuchungen durch /BRU 12/ zeigen, dass die thermolabile Fraktion bei einer Temperatur von 80 °C zur Hälfte und bei 100 °C nahezu vollständig innerhalb von 200 Jahren freigesetzt wird. Für den Verlauf der TUF wird folglich ein exponentieller Anstieg bis 100°C mit dem Wert 0,5 bei 80°C entsprechend

$$k_{\text{TLO}}(\vartheta) \propto \exp\left(-\frac{100\text{ °C} - \vartheta}{100\text{ °C} - 80\text{ °C}} \cdot \ln 2\right) \quad (5.17)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

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

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

### 5.1.18 CO<sub>2</sub>-Desorption

Tone können CO<sub>2</sub>, das während ihrer geologischen Vorgeschichte absorbiert wurde, bei Temperaturerhöhung desorbieren. Der Prozess setzt nach /YES 17/ bei etwa 50 °C ein, erreicht sein Maximum bei etwa 130°C und endet bei etwa 200 °C (Abb. 5.7). Dieser Verlauf kann näherungsweise durch die Verteilungsfunktion der Normalverteilung mit Mittelwert 130 und Standardabweichung 20 beschrieben werden. Die zugehörige TUF repräsentiert die dabei insgesamt freigesetzte Gasmenge und wird dementsprechend durch die zugehörige kumulative Verteilungsfunktion

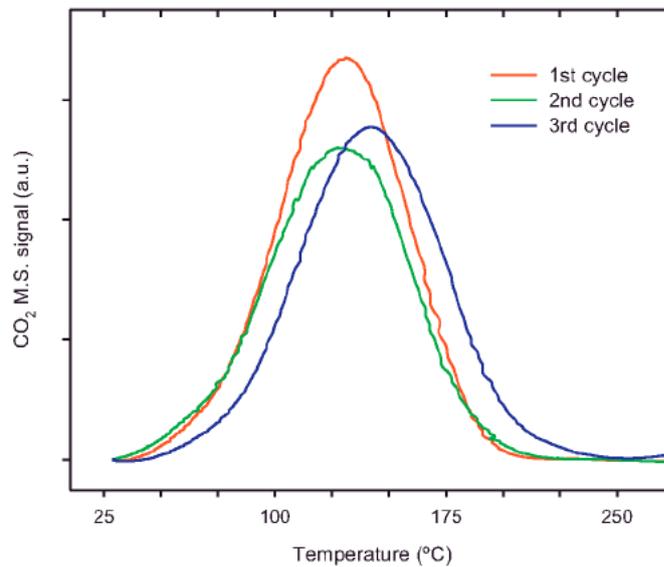
$$k_{\text{Desor}}(\vartheta) = \left( 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{\vartheta - 130 \text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 20 \text{ °C}} \right) \right) / 2. \quad (5.18)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$k_{\text{Desor}}$  [-]: TUF der CO<sub>2</sub>-Desorption

erf: Gaußsche Fehlerfunktion

dargestellt.



**Abb. 5.7** Temperaturabhängigkeit der CO<sub>2</sub>-Desorption nach /YES 17/

### 5.1.19 H<sub>2</sub>-induzierte Pyrit-Reduktion

Bei Temperaturen oberhalb von 90 °C und H<sub>2</sub>-Partialdrücken oberhalb von 1 MPa kann es innerhalb kürzester Zeit durch H<sub>2</sub> zu einer Reduzierung von Pyrit (FeS<sub>2</sub>) in Pyrrhotite (FeS<sub>1+x</sub>) mit gleichzeitiger Freisetzung von (1-x) Mol Hydrogensulfid pro Mol Pyrit kommen /TRU 13/. Daher wird als TUF die Sprungfunktion

$$k_{\text{Pyrit}}(\vartheta) = \begin{cases} 0, & 35 \text{ °C} \leq \vartheta < 90 \text{ °C} \\ 1, & 90 \text{ °C} \leq \vartheta < 250 \text{ °C} \end{cases} \quad (5.19)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$k_{\text{Pyrit}}$  [-]: TUF der H<sub>2</sub>-induzierten Pyrit-Reduktion

betrachtet.

### 5.1.20 Karbonatisierung

Dringt CO<sub>2</sub> in den im Endlager eingebrachten Beton ein, kommt es zur Karbonatisierung. Dies ist ein diffusiver Prozess, der die Alkalinität des Betons zunehmend reduziert. Durch die Bildung von Calcit wird eine Verringerung der Porosität und damit eine Erhöhung der mechanischen Stabilität erreicht, die sich allerdings auf die äußere Schicht des Betons beschränkt /ASH 16/. Diese primäre TUF kann zum jetzigen Zeitpunkt aufgrund der fehlenden Erkenntnisse zur Temperaturabhängigkeit des abzubildenden Prozesses nicht mathematisch beschrieben werden.

### 5.1.21 Betonkorrosion

Die Betonkorrosion ist abhängig von der Zusammensetzung des gewählten Betons und der mit ihm in Kontakt tretenden Lösungen (beispielsweise der Gehalt an Magnesium, Chlorid, Kohlensäure oder Sulfat). Sie nimmt mit steigendem Lösungsangebot und steigender Temperatur zu. Es kommt zu temperaturabhängigen Mineralumwandlungen /LAG 94/. Diese primäre TUF kann zum jetzigen Zeitpunkt aufgrund der fehlenden Erkenntnisse zur Temperaturabhängigkeit des abzubildenden Prozesses nicht mathematisch beschrieben werden.

### 5.1.22 Rissbildung im Beton

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

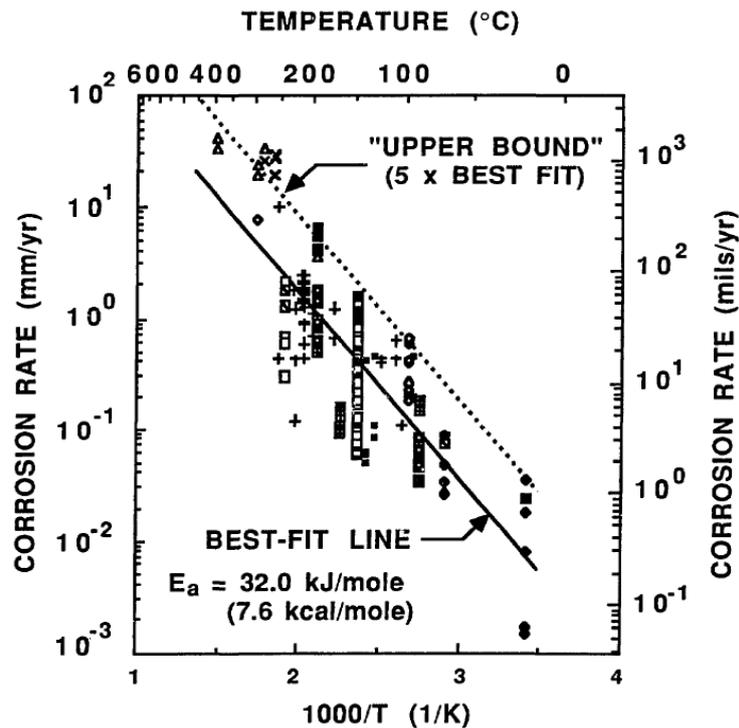
### 5.1.23 Korrosionsrate

Für die Herleitung der TUF „Korrosionsrate“ werden experimentell ermittelte Korrosionsraten für unlegierten Stahl mit einer an NaCl gesättigten Lösung betrachtet. In /DIE 88/ wurde dazu eine große Menge an Daten ausgewertet, die die Temperaturabhängigkeit der Korrosionsrate beschreiben. Insbesondere wurde anhand der Daten eine Parameteranpassung für ein Arrhenius-Gesetz durchgeführt (Abb. 5.8), woraus sich eine Aktivierungsenergie  $E_A = 32 \cdot 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$  (Anstieg der „Best-Fit Line“ in Abb. 5.8) ergibt. Es folgt also für die TUF der Zusammenhang

$$k_{\text{Korr}}(\vartheta) \propto \exp\left(\frac{-32 \cdot 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot (\vartheta + 273 \text{ }^\circ\text{C})}\right) \quad (5.20)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$k_{\text{Korr}}$  [-]: TUF der Korrosionsrate



**Abb. 5.8** Daten zur Temperaturabhängigkeit der Korrosionsraten für unlegierten Stahl in Salzlösung mit Arrhenius-Fit aus /DIE 88/.

### 5.1.24 Korrosionsrate durch H<sub>2</sub>S

Die TUF „Korrosionsrate durch H<sub>2</sub>S“ ergibt sich aus Daten zur temperaturabhängigen Korrosion durch H<sub>2</sub>S in /QI 14/ und /GAO 17/. Aus /QI 14/, Fig. 1 wurden Messwerte für die Korrosion eines Stahls in H<sub>2</sub>S-gesättigter 5 %-iger NaCl-Lösung bei 40 °C, 60 °C und 90 °C berücksichtigt und aus /GAO 17/, Fig. 1 Messwerte für die Korrosion eines Karbonstahls, der sich für jeweils vier Tage in 0,00385-molarer H<sub>2</sub>S-Lösung bei Temperaturen zwischen 80 °C und 200 °C befand. Aus diesen Werten wurde für den Verlauf der TUF geschlossen, dass sich die Korrosionsrate zwischen 35 °C und 60 °C auf 1/3 des Anfangswertes, bis 90 °C auf 1/4 des Anfangswertes, zwischen 90°C und 160 °C nochmals um die Hälfte reduziert und zwischen 160 °C und 200 °C kaum noch eine Änderung

der Korrosionsrate erfolgt. Eine entsprechende Parameteranpassung dieser Annahmen an ein Potenzgesetz führt zu der TUF

$$k_{\text{KorrH}_2\text{S}}(\vartheta) \propto 94,428 \left( \frac{\vartheta}{^\circ\text{C}} \right)^{-1,321} . \quad (5.21)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

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

### 5.1.25 Versprödungsrate

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

### 5.1.26 Viskosität

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

$$\eta_{\text{Lös}}(\vartheta) = \eta_{\text{W}}(\vartheta) \cdot \left( 1 + am + bm^2 + cm^3 + d\vartheta(1 - \exp(km)) \right) \quad (5.22)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$\eta_{\text{W}}$  [cP]: Viskosität von Wasser

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

$a = 0,0816$ : empirischer Parameter

$b = 0,0122$ : empirischer Parameter

$c = 0,000128$ : empirischer Parameter

$d = 0,000629$ : empirischer Parameter

$k = -0,7$ : empirischer Parameter

$m = 0,2$ : molare Konzentration NaCl [mol NaCl / kg  $\text{H}_2\text{O}$ ]

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

$$\eta_{\text{W}}(\vartheta) = 0,0204 \text{ cP} \left( \frac{\vartheta}{^\circ\text{C}} \right)^{-0,942} . \quad (5.23)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$\eta_{\text{W}}$  [cP]: Viskosität von Wasser

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

$$\eta_{\text{Gas}}(\vartheta) \propto \sqrt{\vartheta + 273^{\circ}\text{C}} \quad (5.24)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$\eta_{\text{Gas}}$  : Viskosität des idealen Gases (bis auf einen Faktor)

angenommen.

### 5.1.27 Dichte

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

$$x(\vartheta) = c_1 \cdot \exp(a_1 m) + c_2 \cdot \exp\left(a_2 \frac{\vartheta}{^{\circ}\text{C}}\right) + c_3 \cdot \exp(a_3 p), \quad (5.25)$$

$$\rho(\vartheta) = (A + B \cdot x(\vartheta) + C \cdot x^2(\vartheta) + D \cdot x^3(\vartheta)) \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

$x$  [-]: empirische Funktion

$\rho$  [g/cm<sup>3</sup>]: Dichte von NaCl-Lösung

$c_1 = -9,9595$ : empirischer Parameter

$c_2 = 7,0845$ : empirischer Parameter

$c_3 = 3,9093$ : empirischer Parameter

$a_1 = -0,004539$ : empirischer Parameter

$a_2 = -0,0001638$ : empirischer Parameter

$a_3 = 0,00002551$ : empirischer Parameter

$A = -3,033405$ : empirischer Parameter

$B = 10,128163$ : empirischer Parameter

$C = -8,750567$ : empirischer Parameter

$D = 2,661307$ : empirischer Parameter

$p = 70$ : Druck [bar]

$m = 0,2$ : molare Konzentration NaCl [mol NaCl / kg H<sub>2</sub>O]

verwendet.

### 5.1.28 Rückhaltung

Diese primäre TUF kann zum jetzigen Zeitpunkt aufgrund der fehlenden Erkenntnisse zur Temperaturabhängigkeit des abzubildenden Prozesses bzw. seines elementspezifischen Charakters nicht mathematisch beschrieben werden. Beispielsweise zeigen Radionuklide unterschiedlicher Wertigkeit oder Ladung ein deutlich unterschiedliches Sorptionsverhalten, das neben der Temperatur zudem vom pH und vom Sorbenten abhängig ist. Genauso sind Mineralumwandlungen elementspezifisch und standortabhängig /BRA 19/.

### 5.1.29 Diffusionskoeffizient

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

$$D_{\text{Lös}}(\vartheta) \propto \frac{\vartheta + 273^{\circ}\text{C}}{\eta_{\text{Lös}}(\vartheta)}, \quad (5.26)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

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

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

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

$$D_{\text{Gas}}(\vartheta) \propto \frac{(\vartheta + 273^{\circ}\text{C})^{\frac{3}{2}}}{p(\vartheta)} \propto \sqrt{\vartheta + 273^{\circ}\text{C}} \quad (5.27)$$

$\vartheta$  [°C]: Temperatur

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

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

verwendet.

### **5.1.30 RN-Konzentration**

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

### **5.1.31 Thermische Osmose**

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

### **5.1.32 Bewertung des Wissenstandes zu den primären TUF**

Die Bewertung der primären TUF für das Wirtsgestein Tongestein hinsichtlich der Verfügbarkeit einer mathematischen Beschreibung, der Standort- / Einlagerungskonzept-Abhängigkeit der TUF bzw. des Auftretens eines oder mehrerer zur TUF beitragender Prozesse, der Verwendung der Expertenmeinung bei der Herleitung der mathematischen Beschreibung der TUF bzw. der Notwendigkeit von Forschungsarbeiten zur Verbesserung des Kenntnisstandes über die mathematische Beschreibung der TUF wird in Tab. 5.2 zusammengefasst. Es weist die Aussage „ja / nein“ in der Spalte „Beschreibung/Auftreten Standort- oder ELK-abhängig“ für die primäre TUF „Konsolidierung“ darauf hin, dass die Temperatur des Expansion-Kontraktionsüberganges, welche die mathematische Beschreibung der TUF bestimmt, von der Versenkungsgeschichte des Tongesteins abhängt und somit standortabhängig ist, während das Auftreten des beitragenden assoziierten Prozesses „Konsolidierung“ für alle Tongesteine vorausgesetzt wird. Die Aussage „nein / ja“ in dieser Spalte für die primäre TUF „Karbonatzersetzung“ weist hingegen darauf hin, dass die mathematische Beschreibung der TUF, die aus In-situ-Beobachtungen abgeleitet wurde, an allen Standorten Bestand hat, wobei durch die Verwendung eines karbonatmineraalfreien Bentonits das Auftreten des beitragenden assoziierten Prozesses „Zersetzung von Karbonatmineralen“ zumindest in der Komponente Versatz vermieden werden kann.

**Tab. 5.2** Bewertung der primären TUF für das Wirtsgestein Tongestein

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

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

\*Endlagerkonzept

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

den bestehenden primären TUF die Porosität als eine primäre TUF, andererseits belegt diese Abhängigkeit eine indirekte Einflussnahme der integritätsrelevanten TUF auf den RN-Transport. Der Umgang mit der Porosität und anderen ähnlichen Einflussgrößen wird im nächsten Kapitel beschrieben.

## 5.2 Bilanzierungsgrößen

Wie im vorangehenden Kapitel ausgeführt, wurden bei der Auswertung der Priorisierungsargumentation und der Zuordnung der primären TUF die in der Tab. 5.3 zusammengefassten, temperaturabhängigen Bilanzierungsgrößen identifiziert. Bilanzierungsgrößen sind keine primären TUF, werden jedoch zusammen mit diesen in der Untersuchung der Temperaturunverträglichkeit – wie im nachfolgenden Unterkapitel beschrieben – eingesetzt und stellen wichtige Bausteine des vorliegenden Ansatzes dar. Ihre Benennung rührt daher, dass sie eine Bilanz der beitragenden primären TUF abbilden. Dies ist für das Erzielen eines quantitativ austarierten Ergebnisses im Rahmen des Ansatzes sogar Voraussetzung. Insofern stellen die Bilanzierungsgrößen eine Verbindung zwischen diesem zweckgebundenen vereinfachten Ansatz und einer bilanzierenden Modellierung der Nahfeldentwicklung während des Temperaturimpulses in einem Endlager her. Eine der Beobachtungen der bisherigen Anwendung des Ansatzes ist, dass ausschließlich integritätsrelevante primäre TUF zu Bilanzierungsgrößen beitragen. Es ist ferner festzustellen, dass durch eine gezielte Auswahl des Versatzmaterials, welches z.B. vernachlässigbare Gehalte an adsorbiertem CO<sub>2</sub>, Organik und Pyrit enthält, einzelne Beiträge zu Bilanzierungsgrößen deutlich reduziert werden können.

**Tab. 5.3** Identifizierte Bilanzierungsgrößen mit den beitragenden primären TUF

Bilanzierungsgröße	Beeinflusste Komponente	Beitragende primäre TUF
Porosität	BB.01/ HR.01/ HR.02/ MW.00	Quellen, Konsolidierung (nur HR.01/ HR.02), Smektit-Illitisation, Quarzzementation, Karbonatzersetzung, Mineralumwandlung, Pyrolyse, H <sub>2</sub> -induzierte Pyrit-Reduktion, Karbonatisierung (nur MW.00), Betonkorrosion (nur MW.00), Rissbildung im Beton (nur MW.00)
Gasmenge	WP.00/ BB.01/ HR.01/ HR.02	Korrosionsrate (nur BB.01/ HR.01), Korrosionsrate durch H <sub>2</sub> S (nur BB.01/ HR.01),

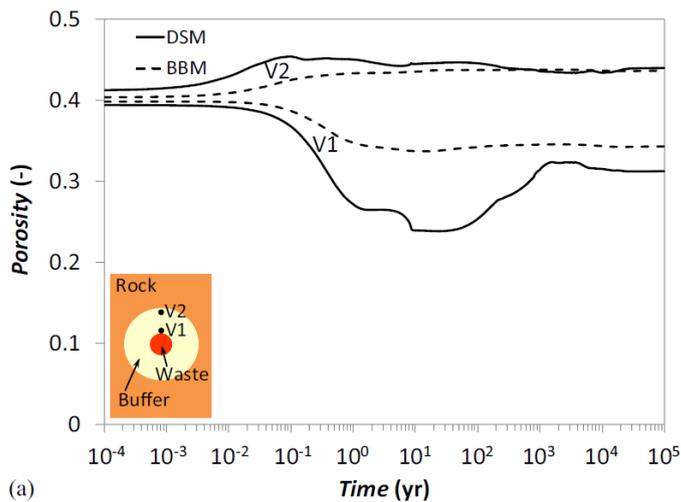
Bilanzierungsgröße	Beeinflusste Komponente	Beitragende primäre TUF
		Karbonatzersetzung, Thermochemische Sulfatreduktion, Mikrobielle Sulfatreduktion, Mikrobielle Eisenreduktion, Methanogenese, Fermentation, Mechanisch induzierte H <sub>2</sub> -Bildung, Pyrolyse, CO <sub>2</sub> -Desorption, Thermolabile Organika, H <sub>2</sub> -induzierte Pyrit-Reduktion, Karbonatisierung (nur MW.00)
H <sub>2</sub> S-Menge	WP.00/ BB.01/ HR.01/ HR.02	Thermochemische Sulfatreduktion, Mikrobielle Sulfatreduktion, Thermolabile Organika, H <sub>2</sub> -induzierte Pyrit-Reduktion

### 5.2.1 Porosität<sup>4</sup>

Für die Bilanzierungsgröße „Porosität“ kann für das intakte Tongestein (ewG) anhand der Mittelwerte der effektiven Porosität im Bereich von 7,0 – 15,5 Volumen-% für die Schichten Barremium / Hauterivium der Unterkreidetone /JAH 13/ bzw. im Bereich von 5,8 – 7,7 Volumen-% für Opalinuston aus der Bohrung Benken /JAH 16/ der Anfangs- und Endwert von 10 Volumen-% angenommen werden. Für die ALZ kann anhand der Porositätswerte im Bereich von 12 – 40 Volumen-% /MAR 18/ der Anfangswert von 20 Volumen-% und für Bentonit bei einer Trockendichte von 1,6 g/cm<sup>3</sup> der Anfangswert von 40 Volumen-% /GEN 09/, /RUT 14/, /VIL 16/ angenommen werden. Die Ergebnisse der THM-Simulationen /RUT 14/, /VIL 16/ zeigen, dass sich die mittlere Porosität eines Bentonitversatzes<sup>5</sup> aufgrund des Quellens in den behälterfernen Schichten und des ausbleibenden Quellens in den behälternahen Schichten innerhalb des thermischen Impulses nicht ändert (Abb. 5.9). Daher wird für den Versatz kein Beitrag der TUF „Quellen“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ ausgewiesen. Die Porosität in der ALZ kann laut /ALC 17/ nach ca. 20.000 Jahren und somit noch innerhalb des Temperaturimpulses 20 % oberhalb des Anfangswertes liegen. Daher wird für die ALZ der maximale Beitrag der TUF „Quellen“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ auf –8 Volumen-% festgelegt.

<sup>4</sup> S. Datenblatt „Berechnungen-Ton“ in der Datenbank zur detaillierten Ableitung der Beiträge der einzelnen TUF zu dieser Bilanzierungsgröße.

<sup>5</sup> Es wird im Folgenden bei der Ableitung der Bilanzierungsgrößen angenommen, dass der Versatz aus einem Bentonit besteht.

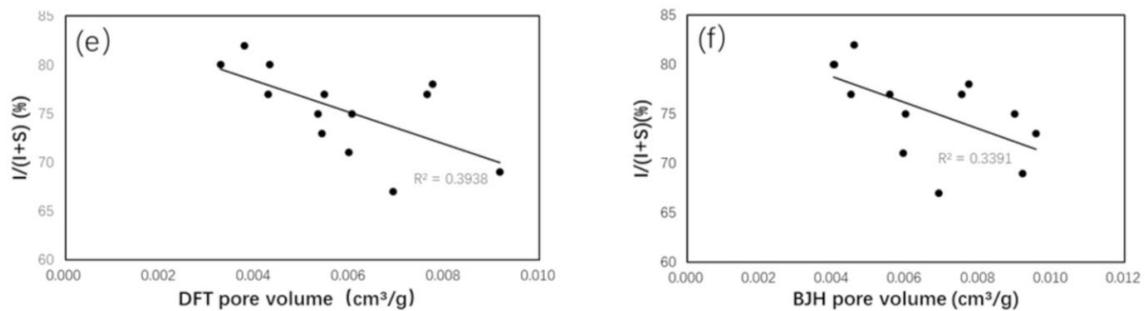


**Abb. 5.9** Modellhafte Entwicklung der Porosität in einem Bentonitversatz in einem Endlager im Opalinuston /VIL 16/

Für Tongesteine, die während des Temperaturimpulses auf Temperaturen oberhalb der in ihrer Versenkungsgeschichte erfahrenen maximalen Temperatur – z. B. für Opalinuston je nach Methode 80 – 90 °C /ELI 08/ bzw. 90 – 105 °C /KNE 23/ – erhitzt werden, kann die Konsolidierung zu einer Porositätsabnahme in der ALZ und im ewG führen, wie in der Abb. 5.2 für Opalinuston veranschaulicht (und in der Gleichung (3) approximiert) wird. Der Wert der linearen thermischen Expansion reduziert sich in diesem Beispiel von 0,0 % bei ca. 112 °C auf ca. –0,096 % bei 140 °C, woraus sich eine Neigung von –0,0034 % pro °C errechnet und – in der Annahme einer weiterhin linearen Abnahme auch oberhalb von 140 °C – ein Wert von –0,51 % bei 250 °C extrapolieren lässt. Die volumetrische Expansion kann als das Dreifache der linearen Expansion /GEV 81/ auf den Wert von ca. –1,5 Volumen-% abgeschätzt werden. Dieser Wert stellt den maximalen Beitrag der TUF „Konsolidierung“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ in der ALZ und im ewG dar.

In /JAH 16/ wird der Anteil der Illit-Smektit-Wechselagerung – der einzigen Smektit-haltigen Mineralphase – im Opalinuston auf 16 % geschätzt. Laut /KNE 23/ beträgt der Illit-Anteil in der Illit-Smektit-Wechselagerung des Opalinustons etwa 80 %, so dass der Smektit-Anteil im Opalinuston insgesamt bei 3 – 4 % liegt. Entsprechend der Diskussion bei /BRA 19/ zur Smektit-Illit-Reaktion in Tongesteinen kann eine weitere Reduktion des Smektit-Anteils im Opalinuston beim Überschreiten der zuvor erwähnten, maximalen Versenkungstemperatur und insbesondere bei der maximalen hier betrachteten Temperatur innerhalb des Temperaturimpulses nicht ausgeschlossen werden. Unter der Annahme, dass der Illit-Anteil in der Illit-Smektit-Wechselagerung dabei auf 90 % ansteigt,

kann entsprechend der folgenden Abb. 5.10 eine Abnahme des mit der Illit-Smektit-Wechselagerung assoziierten Porenvolumens auf 0 cm<sup>3</sup>/g abgeleitet werden. Unter einer weiteren Annahme, dass die mit der Illit-Smektit-Wechselagerung assoziierte Porosität im Opalinuston dem Anteil dieser Wechselagerung entspricht, kann der maximale Beitrag der TUF „Smektit-Illitisierung“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ in der ALZ und im ewG auf ca. -1,5 Volumen-% quantifiziert werden.



**Abb. 5.10** Änderung des Porenvolumens mit dem Illit-Anteil in der Illit-Smektit-Wechselagerung in einem Tongestein /HUC 21/

Da für Bentonite sowohl an einem Standort im Opalinuston als auch in Unterkreidetonen zwei Einflussfaktoren, die die Smektit-Illit-Reaktion beschleunigen – erhöhte Salinität und einlagerungskonzeptspezifisch Alkalinität /BRA 19/ – greifen werden, kann auch eine weitgehende Smektit-Illit-Reaktion im Versatz bei erhöhten Temperaturen angenommen werden. Entsprechend der Diskussion bei /BRA 19/ zur Smektit-Illit-Reaktion in Bentonitformationen kann innerhalb des Temperaturimpulses eine Umwandlung von 50 – 70 % der Smektite in Illit (mit der dann vorherrschenden R1- und R3-Ordnung der Illit-Smektit-Wechselagerung) bei der maximalen hier betrachteten Temperatur nicht ausgeschlossen werden. Aus der Abb. 5.10 lässt sich ein Porositätsvolumen von ca. 0,05 cm<sup>3</sup> pro g Smektit bei 0 % Illit in der Illit-Smektit-Wechselagerung extrapolieren. Die Zunahme des Illit-Anteils auf 70 % entspricht dann im Bentonitversatz mit einer Dichte von 1,6 g/cm<sup>3</sup> und einem Smektit-Anteil von 70 % einer Abnahme der assoziierten Porosität von ca. 6 Volumen-% auf ca. 1 Volumen-%. Dementsprechend wird der maximale Beitrag der TUF „Smektit-Illitisierung“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ im Versatz auf -5 Volumen-% quantifiziert.

Der Beitrag der TUF „Quarzzementation“ zur Porositätsabnahme wird durch die TUF „Smektit-Illitisierung“ berücksichtigt, weil die Quarzbildung aus der Smektit-Illit-Reaktion erfolgt /BRA 19/. Die Beeinträchtigung des Quellverhaltens der verbleibenden quellfähigen Smektite durch die Quarzzementation stellt jedoch einen zusätzlichen Effekt dar. Da

allerdings das Quellen des Bentonits die Porosität im Versatz bereits nach wenigen Hundert Jahren nicht mehr verändert (Abb. 5.9), kann der ggf. mögliche indirekte Beitrag der TUF „Quarzzementation“ über die TUF „Quellen“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ im Versatz in erster Näherung vernachlässigt werden. Aufgrund des niedrigen Smektit-Anteils im Opalinuston, kann diese Annahme auch auf die ALZ und den ewG übertragen werden.

Die Zersetzung der Karbonatminerale im Ton kann zur Porositätszunahme beitragen. Da der Anteil der Karbonatminerale z. B. im Opalinuston ca. 20 % beträgt /JAH 16/, könnte dieser Prozess einen signifikanten Einfluss auf die Porosität haben. Allerdings kann angenommen werden, dass dieser Prozess im gesättigten Tongestein, in dem keine Gasphase vorhanden ist /JAH 13/, /JAH 16/, durch die CO<sub>2</sub>-Löslichkeit im Porenwasser begrenzt wird. Ausgehend von der CO<sub>2</sub>-Löslichkeit von ca. 0,4 mol/kg H<sub>2</sub>O bei 250 °C und einem Fluiddruck von 7 MPa /VUL 08/ sowie von einem Wassergehalt von 10 Volumen-% kann die Auflösung von ca. 0,8 % der Karbonatminerale bzw. eine Porositätszunahme um 0,15 Volumen-% errechnet werden, die den maximalen Beitrag der TUF „Karbonatzersetzung“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ im ewG darstellt.

In einer ungesättigten ALZ ergibt sich aus der zuvor angenommenen Anfangsporosität von 20 Volumen-% und der wassergefüllten Porosität des Tongesteines von 10 Volumen-% das Volumen der Gasphase von 10 Volumen-%. Aus der CO<sub>2</sub>-Dichte von ca. 80 kg/m<sup>3</sup> bei 250 °C und dem Fluiddruck von 7 MPa kann eine Auflösung von ca. 3,8 % der Karbonatminerale bzw. eine Porositätszunahme um 0,67 Volumen-% aufgrund der CO<sub>2</sub>-Akkumulierung in der Gasphase der ALZ errechnet werden. Zusammen mit den zuvor errechneten 0,15 Volumen-% aufgrund der CO<sub>2</sub>-Akkumulierung in der Lösungsphase ergibt sich für die ALZ zunächst eine Porositätszunahme von ca. 0,8 Volumen-%.

Im ungesättigten Versatz mit einer zuvor angenommenen Anfangsporosität von 40 Volumen-% hängt die potenzielle Porositätszunahme von den Annahmen zu Wasser- und Karbonatgehalt ab. Unter der Annahme der Einbringsättigung des Versatzes von 0,65 /MIL 16/, die einer wassergefüllten Porosität von 26 Volumen-% entspricht, und eines Karbonatgehaltes von 1 %, kann analog zum Rechenweg für den ewG die Auflösung von ca. 65 % der Karbonatminerale bzw. eine Porositätszunahme um 0,38 Volumen-% aufgrund der CO<sub>2</sub>-Akkumulierung in der Lösungsphase errechnet werden. Die Gasphase im Versatz beträgt entsprechend der getroffenen Annahmen 14 Volumen-% und kann bei 250 °C und dem Fluiddruck von 7 MPa ca. 160 % der im Versatz vorhandenen Karbonatminerale aufnehmen. Dementsprechend kann eine weitere Porositätszunahme um

0,21 Volumen-% aufgrund der Auflösung der restlichen 35 % der Karbonatminerale und der CO<sub>2</sub>-Akkumulierung in der Gasphase des Versatzes errechnet werden. Der maximale Beitrag der TUF „Karbonatzersetzung“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ im Versatz beträgt entsprechend ca. 0,6 Volumen-%.

Da das Porenvolumen im Versatz mehr CO<sub>2</sub> speichern als der Versatz aufgrund der Zersetzung der Karbonatminerale produzieren kann und der Versatz über den gaspermeablen Ausbau im Kontakt mit der ALZ ist, folgt aus den vorangehenden Ausführungen, dass sich aufgrund der CO<sub>2</sub>-Akkumulierung in der Gasphase des Versatzes in der ALZ ca. 1,5 % der Karbonatminerale bzw. eine Porositätszunahme um 0,27 Volumen-% ergibt. Zusammen mit den zuvor für die ALZ errechneten 0,8 Volumen-% ergibt sich der maximale Beitrag der TUF „Karbonatzersetzung“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ in der ALZ von ca. 1,1 Volumen-%.

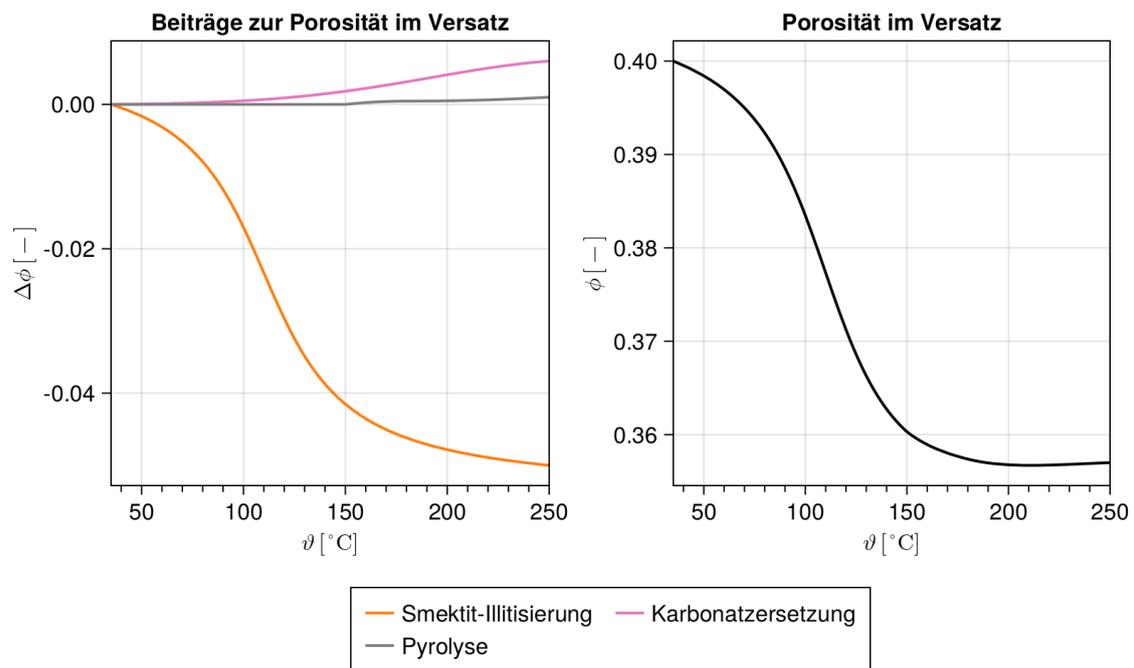
Der maximale Beitrag der TUF „Pyrolyse“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ im ewG und in der ALZ kann ausgehend aus dem Organik-Gehalt von 0,5 % im Opalinuston /JAH 16/ und daraus, dass die Gasproduktion durch Pyrolyse im Temperaturbereich von 150–250 °C unterhalb von ca. 20 % der Gesamtgasproduktion durch Pyrolyse des Kerogens liegt /BRU 12/, auf ca. 0,1 Volumen-% geschätzt werden. Für den Versatz wird – in Ermangelung der Eckdaten zur mineralogischen Zusammensetzung – der Organik-Gehalt des Opalinustons von 0,5 % angenommen, aus dem sich der maximale Beitrag der TUF „Pyrolyse“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ im Versatz von 0,1 Volumen-% ergibt.

Für den Pyrit im Opalinuston wird der Gehalt von 1,1 % ausgewiesen /JAH 16/, der für den ewG und die ALZ übernommen werden kann. Pyrit-Umwandlung in Bentoniten ist eine zu berücksichtigende Reaktion /KAU 23/, weil einige Bentonite Pyrit zu ähnlichen Anteilen wie im Opalinuston enthalten können /UFE 08/, /KAU 12/. Da bei der H<sub>2</sub>-induzierten Reduktion Pyrit vollständig umgesetzt wird, kann aus der mittleren Dichte von 5,1 g/cm<sup>3</sup> des Pyrits der maximale Beitrag der TUF „H<sub>2</sub>-induzierte Pyrit-Reduktion“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ im ewG, in der ALZ und im Versatz von jeweils 0,5 und 0,4 Volumen-% abgeleitet werden. Ein Versatz mit einem vernachlässigbaren Pyrit-Gehalt ist allerdings im Fall von Bentonit durchaus realisierbar /UFE 08/, /KAU 12/.

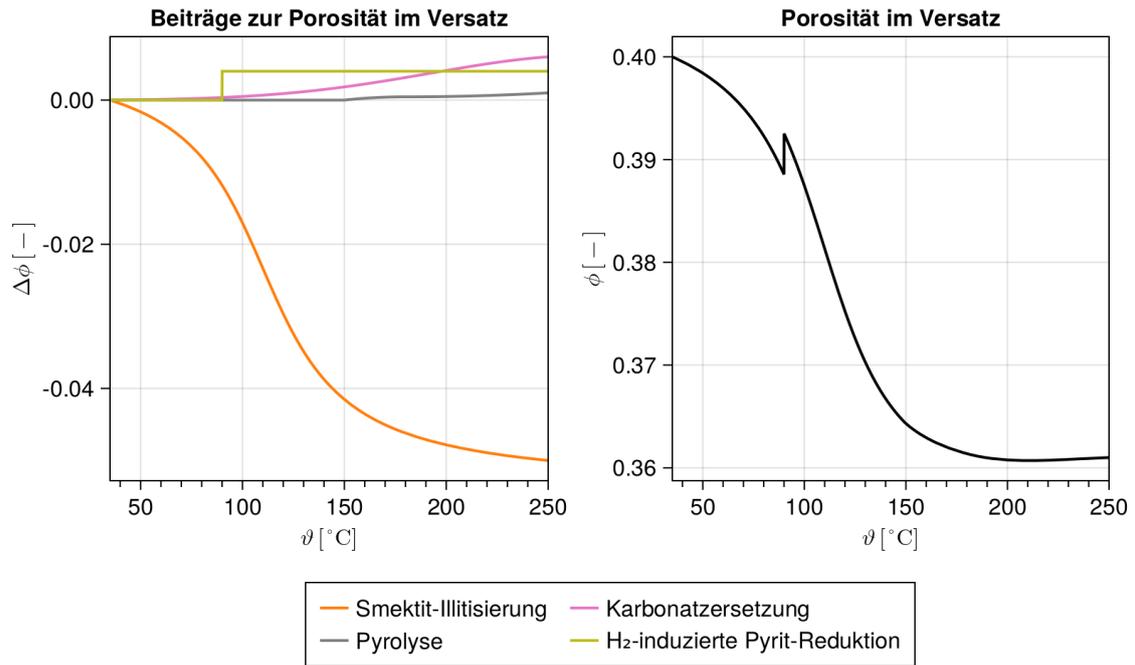
Die Mineralumwandlung kann je nach Identität der Minerale die Porosität ebenfalls beeinflussen. Allerdings ist dieser Einfluss standortabhängig und, im Fall vom Versatz,

auch einlagerungskonzeptabhängig und kann in der vorliegenden Analyse nicht quantifiziert werden.

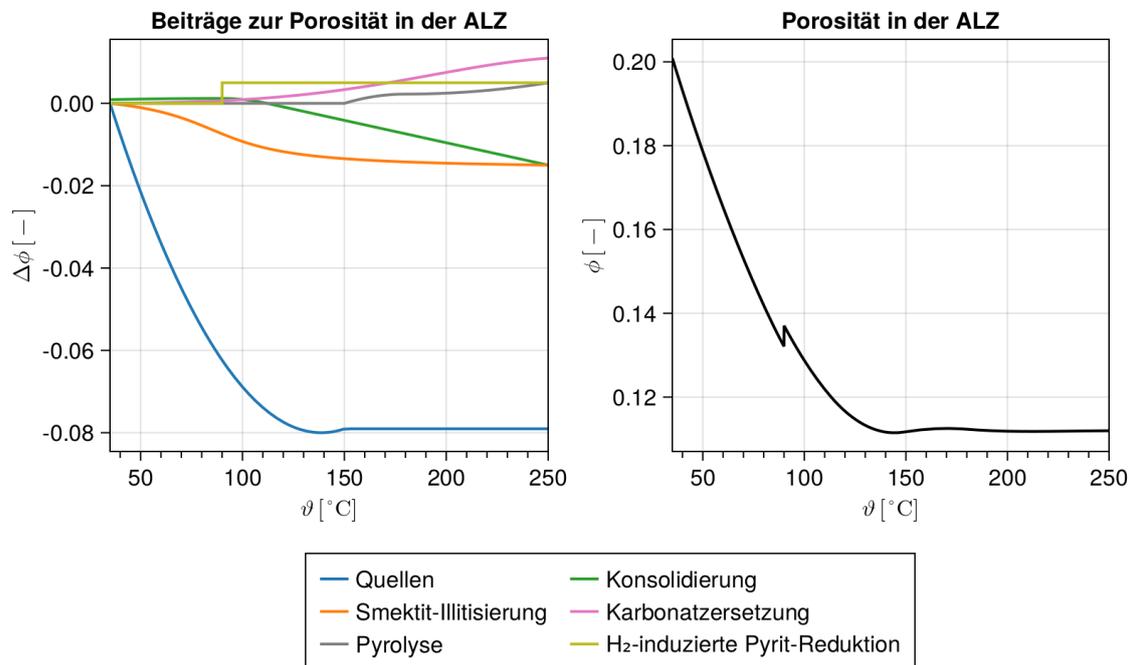
Zusammenfassend ist die Bilanzierung der Porosität in Versatz, ALZ und ewG in Abb. 5.11 (Versatz ohne Pyrit), Abb. 5.12 (Versatz mit Pyrit), Abb. 5.13 (ALZ) und Abb. 5.14 (ewG) dargestellt.



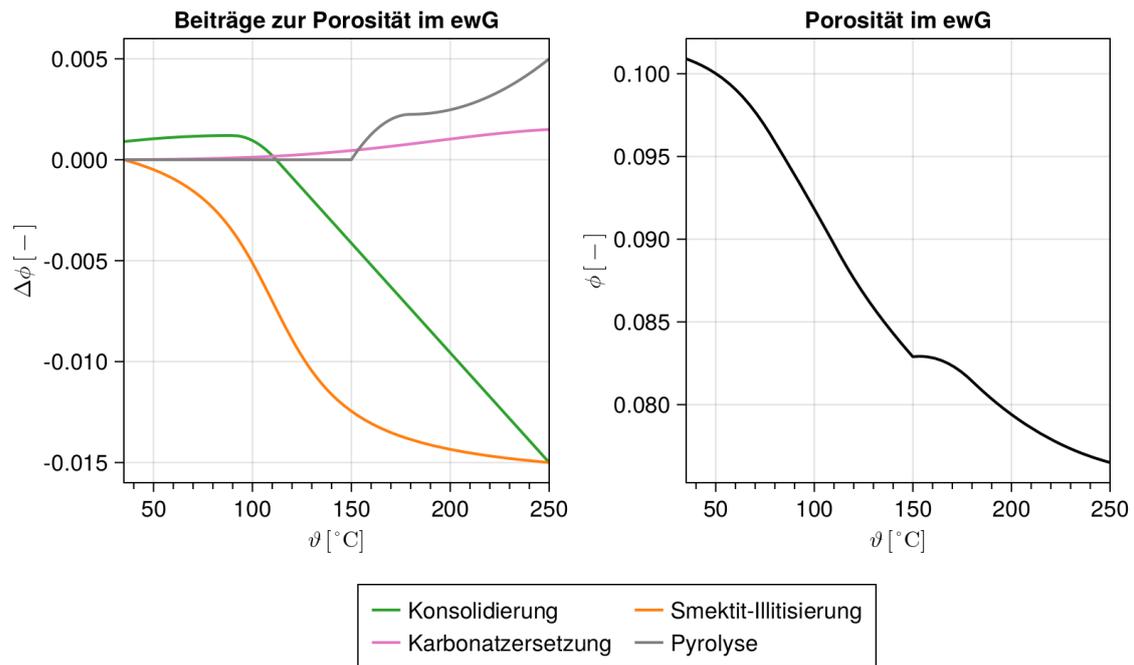
**Abb. 5.11** Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) im Versatz (ohne Pyrit)



**Abb. 5.12** Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) im Versatz (mit Pyrit)



**Abb. 5.13** Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) in der ALZ



**Abb. 5.14** Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) im ewG

### 5.2.2 Lösungsmenge

Eine Bilanzierung der für die Korrosionsreaktion der Behälter notwendigen Lösungsmenge erfolgt (im Gegensatz zum Wirtsgestein Steinsalz) für ein Endlager im Tongestein nicht, da im Versatz und in den weiteren Komponenten von einer dafür ausreichenden Lösungsverfügbarkeit am Behälter ausgegangen werden kann /SEN 08/. In der Tat, auch bei einem beispielhaft für das Schweizer Einlagerungskonzept im Opalinuston maximalen, erwarteten Korrosionsgasdruck von bis zu 15 MPa, wird sich eine minimale Sättigung des Bentonitversatzes von 85 % und dementsprechend eine minimale relative Luftfeuchtigkeit von 90 % in Kontakt mit dem Behälter einstellen, die einen Schwellenwert für die maximale Korrosionsrate darstellt /SEN 08/. Die Lösungsmenge entspricht grundsätzlich der Bilanzierungsgröße „Porosität“ im ewG und ergibt sich als Differenz der Bilanzierungsgrößen „Porosität“ und „Gasmenge“ in der ALZ und im Versatz. Es wird entsprechend /SEN 08/ und der zuvor in diesem Unterkapitel bei der Diskussion des Beitrags des Quellens zur Porosität erwähnten Arbeiten davon ausgegangen, dass ab einem bestimmten minimalen Abstand vom Behälter eine durchgehende – d. h. nicht von einer Gasphase großräumlich unterbrochene – Lösungsphase im Porenraum des Versatzes und der ALZ existiert.

### 5.2.3 Gasmenge<sup>6</sup>

Ausgehend aus der obigen Diskussion zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ können für die Quantifizierung der Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ die Porositätsanfangswerte von 20 Volumen-% in der ALZ und 40 Volumen-% im Versatz (laut Prämissen ist im ewG keine Gasphase vorhanden) als Berechnungsgrundlage verwendet werden. Da die wasergesättigte Porosität im Tongestein (ewG) – wie oben angenommen – 10 Volumen-% beträgt, kann das Gasvolumen in der ALZ zunächst auf 10 Volumen-% festgelegt werden. Der Einbringsättigung des Versatzes von 0,65 /VIL 16/ entspricht das Gasvolumen von 14 Volumen-% im Versatz. Aerobe Bakterien können innerhalb von einigen Monaten /GIR 18/ bzw. wenigen Jahren den Sauerstoff, welcher 22 % des Gasvolumens im Versatz und der ALZ beiträgt, im ELS verbrauchen /PUI 01/ zudem bildet Bentonit eine wichtige Senke für Sauerstoff /GIR 18/, sodass das danach verbleibende Gas sauerstofffrei ist und Anfangsvolumina von 11 Volumen-% im Versatz und 7,8 Volumen-% in der ALZ aufweist. Bezogen auf 1 m<sup>3</sup> Ton entsprechen diese Werte den Anfangswerten der Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ von 3,1 Mol im Versatz und 4,4 Mol in der ALZ.

Anhand der Berechnungen für POLLUX-3-Behälter /JOB 16/ werden entsprechend einer bei 90 °C ermittelten Korrosionsrate pro Behälter ca. 30 Mol H<sub>2</sub> pro Jahr bzw. insgesamt  $6 \times 10^5$  Mol innerhalb der ersten 20.000 Jahre der Nachverschlussphase und ca. 5 Mol pro Jahr bzw. insgesamt  $5 \times 10^4$  Mol innerhalb der nächsten 10.000 Jahre oder insgesamt  $6,5 \times 10^5$  Mol bis zum angenommenen Endzeitpunkt des Temperaturimpulses produziert. Diese Gasmenge entspricht bei einem angenommenen Formationsporendruck von 7 MPa im Einlagerungsbereich einem Gasvolumen von 281 m<sup>3</sup> bei 90 °C.

Allerdings kann aufgrund eines hydraulischen Kontaktes zwischen dem Versatz und der ALZ nicht vom Verbleib dieses Gases im Versatz, sondern von einem anteiligen Übertrag in die benachbarte ALZ (entsprechend der Prämisse einer teilweise entsättigten Zone des Wirtsgesteins) ausgegangen werden, deren Mächtigkeit hier bei 1 m angenommen wird. Um diese Gasmenge auf 1 m<sup>3</sup> Ton im Versatz und in der ALZ beziehen zu können, braucht es eine Annahme zum Behälterabstand innerhalb einer Einlagerungsstrecke. Es steht diesem Gasvolumen im Versatz und in der ALZ bei einem Behälterabstand von 5,5 m ein Porengasraum von ca. 51 m<sup>3</sup> zur Verfügung. Sollte das gesamte produzierte

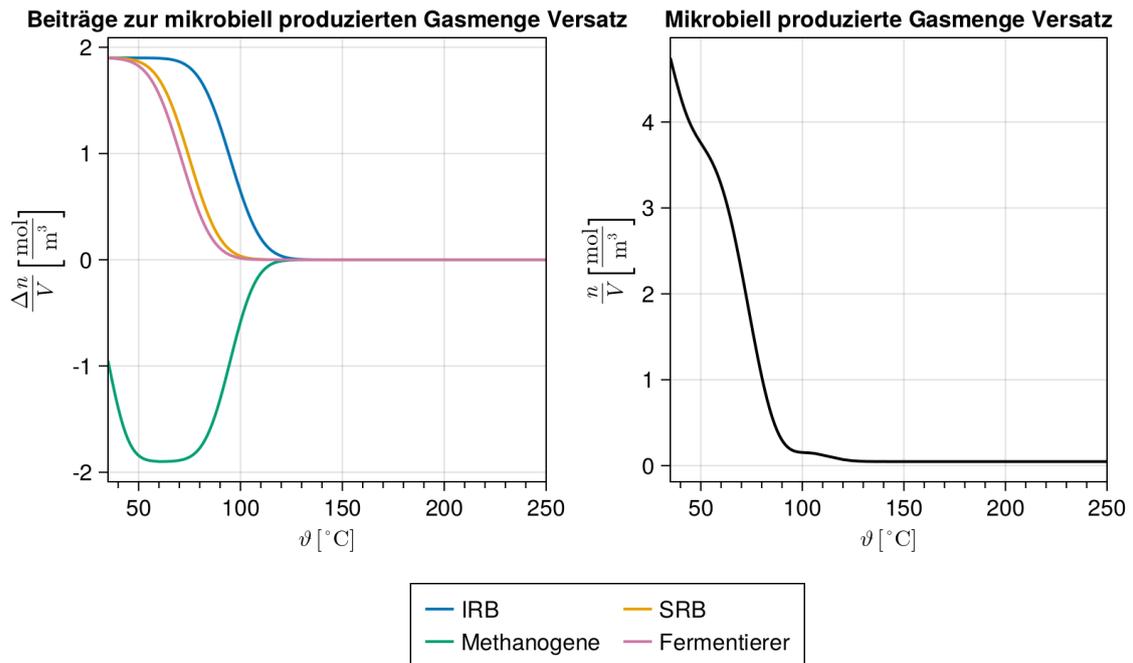
---

<sup>6</sup> S. Datenblatt „Berechnungen-Ton“ in der Datenbank zur detaillierten Ableitung der Beiträge der einzelnen TUF zu dieser Bilanzierungsgröße.

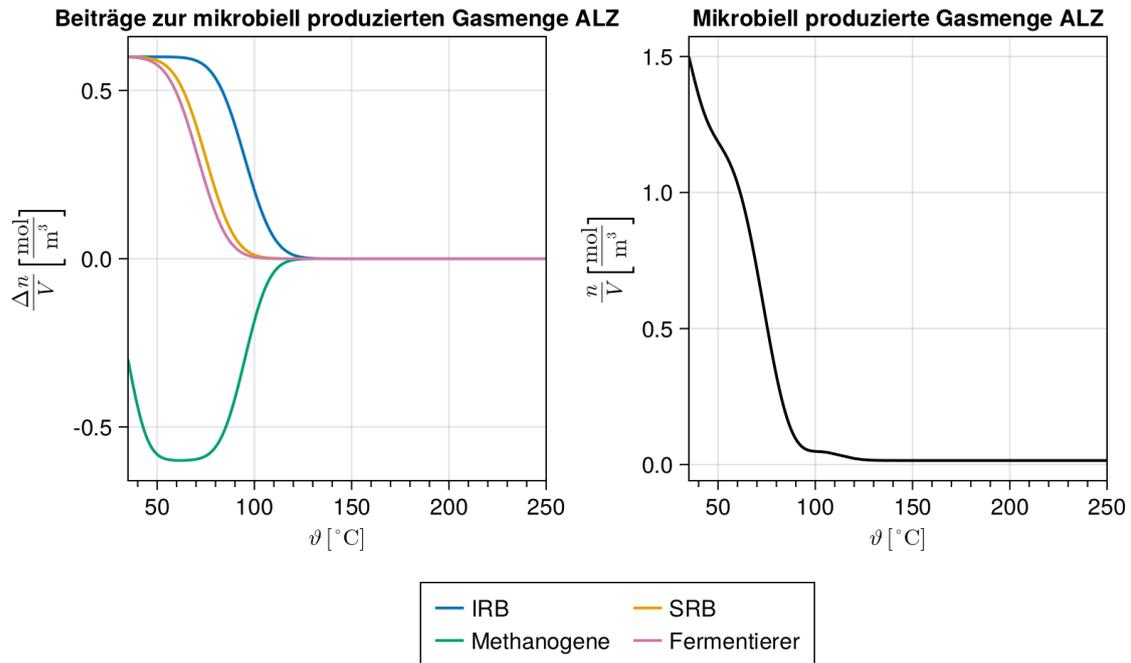
Gas im Versatz und in der ALZ verbleiben, würde der sich ergebende Gasdruck von ca. 38 MPa erheblich über dem Schwellenwert für den dilatanzgesteuerten Gasfluss von 13 – 15 MPa für Opalinuston /SEN 08/ liegen. Daher wird im Weiteren von einem größeren Behälterabstand von 27,5 m ausgegangen, bei dem sich im Porengasraum des Versatzes und der ALZ bei 90 °C ein Gasdruck von ca. 12,6 MPa einstellt. Daraus ergibt sich ein Versatzvolumen von 851 m<sup>3</sup> und ein ALZ-Volumen von 369 m<sup>3</sup> pro Behälter sowie der Beitrag von jeweils 407 Mol und 126 Mol (bezogen auf 1 m<sup>3</sup> Ton) der TUF „Korrosionsrate“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ im Versatz bzw. in der ALZ bei 90 °C. Wie zur abgeleiteten TUF „Korrosion“ im folgenden Abschnitt (Unterkapitel 5.3.1) diskutiert wird, wird für den Bentonitversatz von einer diffusionsgesteuerten Korrosion ausgegangen, für die der Anstieg des Diffusionskoeffizienten (Unterkapitel 5.1.29) um einen Faktor von 1,2 bei einem Temperaturanstieg von 90 °C auf 250 °C bzw. eine Abnahme um einen Faktor von 1,1 bei einer Temperaturabnahme von 90 °C auf 35 °C gilt. Daraus ergibt sich der maximale Beitrag (bezogen auf 1 m<sup>3</sup> Ton) der TUF „Korrosionsrate“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ von 375 Mol bei 35 °C und 488 Mol bei 250 °C im Versatz sowie von 116 Mol bei 35 °C und 151 Mol bei 250 °C in der ALZ.

Bei den für die mikrobielle Sulfatreduktion günstigen Bedingungen wird die Menge des zur Behälteroberfläche zuströmenden Sulfids durch diese maßgeblich dominiert /PEK 19/ und beträgt innerhalb von 30.000 Jahren ca. 618 Mol pro Behälter bei einem Behälterabstand von 0 m entsprechend dem in /PEK 19/ verwendeten 1D-Radialgeometriemodell. Bei einem zuvor diskutierten Behälterabstand von 27,5 m skaliert sich diese Gasmenge um den Faktor 5 auf 3110 Mol pro Behälter bzw. 2,5 Mol bezogen auf 1 m<sup>3</sup> Ton im Versatz und in der ALZ. Da der Verteilungskoeffizient des H<sub>2</sub>S zwischen der Gasphase und dem Wasser von ca. 10.000 /FER 03/ einen Übergang in die Gasphase erheblich begünstigt, kann das im Versatz und in der ALZ verfügbare H<sub>2</sub>S der Gasphase zugeordnet werden. Daher verteilt sich diese Gasmenge entsprechend den Beiträgen des Porengasraums des Versatzes und der ALZ auf 1,9 Mol bezogen auf 1 m<sup>3</sup> Ton im Versatz und 0,6 Mol bezogen auf 1 m<sup>3</sup> Ton in der ALZ. Diese Gasmenge stellt den maximalen Beitrag der TUF „Mikrobielle Sulfatreduktion“ dar und kann in erster Näherung auch als Maß für den jeweils maximalen Beitrag der TUF „Mikrobielle Eisenreduktion“, „Fermentation“ und – mit negativem Vorzeichen – „Methanogenese“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ im Versatz (Abb. 5.15) bzw. in der ALZ (Abb. 5.16) angenommen werden. Falls die maximale Temperatur in einer Endlagerkomponente oberhalb des Temperaturbereiches der jeweiligen mikrobiellen Prozesse zu einem Zeitpunkt der Nachverschlussphase liegt, kann für eine transiente Phase – bis diese Temperatur

erreicht wird – das Vorhandensein einer mikrobiellen Aktivität angenommen werden. Allerdings kann diese transiente Phase höchstens einige Jahrhunderte dauern und somit nur in einem niedrigen einstelligen Prozentbereich der Gesamtdauer von 30.000 Jahren des Temperaturimpulses liegen. Daher kann für den Beitrag der mikrobiellen Prozesse oberhalb des Temperaturbereiches ihrer Aktivität höchstens 1 % ihres Beitrages bei 35 °C angenommen werden.



**Abb. 5.15** Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur mikrobiell produzierten Gasmenge (links) und resultierende Gasmenge (rechts) im Versatz



**Abb. 5.16** Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur mikrobiell produzierten Gasmenge (links) und resultierende Gasmenge (rechts) in der ALZ

Laut /PEK 19/ beträgt die Sulfatkonzentration in der ALZ 0,017 Mol/L und im Versatz 0,1 Mol/L. Bei den zuvor diskutierten Wassergehalten von 10 Volumen-% in der ALZ und 26 Volumen-% im Versatz und unter der Annahme, dass das gesamte Sulfat in diesen Komponenten innerhalb des Temperaturimpulses in Sulfid thermochemisch reduziert wird und der Zustrom aus dem ewG, der gemäß der Prämisse keine freie Gasphase enthält, diesen Verbrauch nicht kompensiert, ergeben sich maximale Beiträge der TUF „Thermochemische Sulfatreduktion“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ von 1,7 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton in der ALZ (Abb. 5.19) und 26 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton im Versatz (Abb. 5.17 und Abb. 5.18).

Der maximale Beitrag der TUF „Karbonatzerersetzung“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ ergibt sich aus den oben – bei der Ableitung der Beiträge der TUF „Karbonatzerersetzung“ zur Porosität – errechneten Anteilen an zersetzten Karbonatmineralen (5,3 % in der ALZ und 35 % im Versatz) zu 182 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton in der ALZ und 129 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton im Versatz des in der Gasphase akkumulierten CO<sub>2</sub>.

Entsprechend dem CO<sub>2</sub>- und H<sub>2</sub>S-Gehalt der thermolabilen Organika von bis zu 10 % bzw. 1,7 % der Kerogenmasse im Ton /BRU 12/ kann für den Versatz und die ALZ mit

dem bei der obigen Diskussion zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ angenommenen Organik-Gehalt von 0,5 % von einer Überführung von maximal 0,05 % der Komponentenmasse als CO<sub>2</sub> und 0,0085 % als H<sub>2</sub>S in die Gasphase ausgegangen werden. Aus diesen Werten ergeben sich maximale Beiträge der TUF „Thermolabile Organika“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ von 31 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton in der ALZ und 26 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton im Versatz.

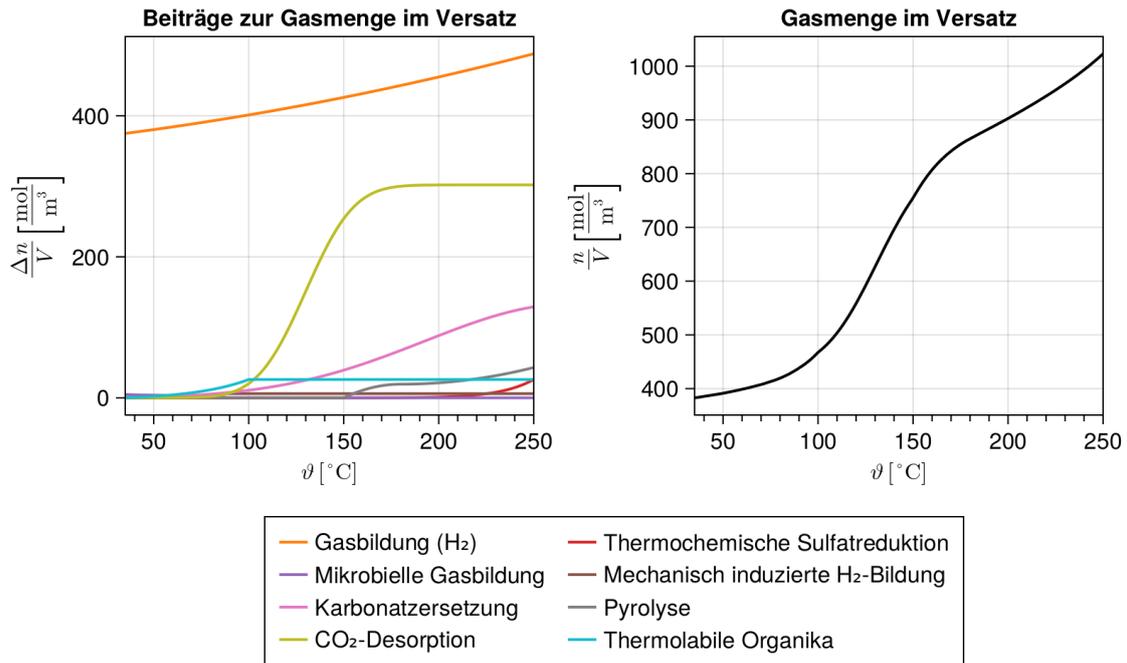
Wie oben bei der Porositätsbilanzierung angenommen, kann durch die Pyrolyse bis 250 °C ca. 20 % der Kerogenmasse in die Gasphase überführt werden. Daraus ergeben sich maximale Beiträge der TUF „Pyrolyse“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ von 52 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton in der ALZ und 43 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton im Versatz.

Entsprechend dem oben bei der Porositätsbilanzierung angenommenen Pyrit-Gehalt von 1,1 % in der ALZ und im Versatz, kann der maximale Beitrag der TUF „H<sub>2</sub>-induzierte Pyrit-Reduktion“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ auf 208 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton in der ALZ und 173 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton im Versatz quantifiziert werden. Für den Versatz wird bei der Gasmengenbilanzierung (wie schon bei der Porositätsbilanzierung) eine Variante ohne Pyrit (Abb. 5.17) und eine mit Pyrit (Abb. 5.18) betrachtet. Im ewG wird keine H<sub>2</sub>-induzierte Pyrit-Reduktion erwartet, weil dort entsprechend der Prämisse des Ansatzes keine freie Gasphase existiert und somit kein für diesen Prozess notwendiger H<sub>2</sub>-Partialdruck von mindestens 10 bar hergestellt werden kann.

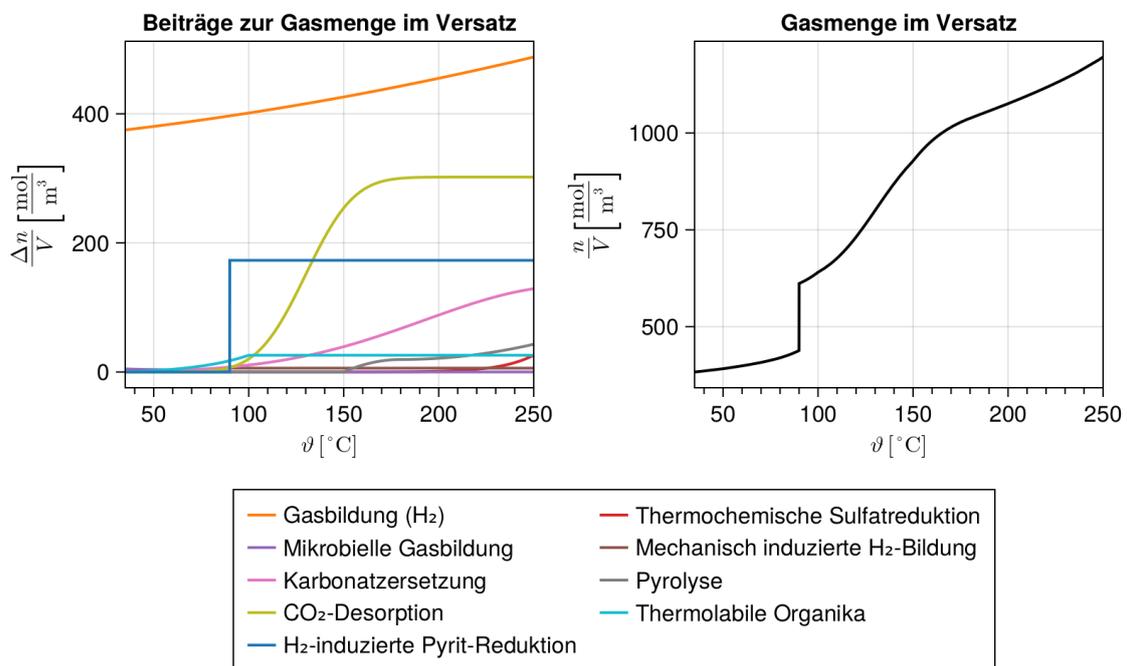
Falls das Tongestein in der ALZ und der Bentonit des Versatzes in der geologischen Vorgeschichte CO<sub>2</sub> adsorbiert haben, kann dessen Gehalt bis zu ca. 0,2 Mol pro kg Ton betragen /CHE 13/, /BUS 16/, /YES 17/. Aus diesem Wert ergibt sich der maximale Beitrag der TUF „CO<sub>2</sub>-Desorption“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ von 163 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton in der ALZ und 302 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton im Versatz.

Aus der maximalen für Silikatminerale beobachteten, mechanischen Produktion von 3 µmol H<sub>2</sub> pro g Gestein /STO 22/ ergibt sich der maximale Beitrag der TUF „Mechanisch induzierte H<sub>2</sub>-Bildung“ zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ von 7 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton in der ALZ und 6 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton im Versatz.

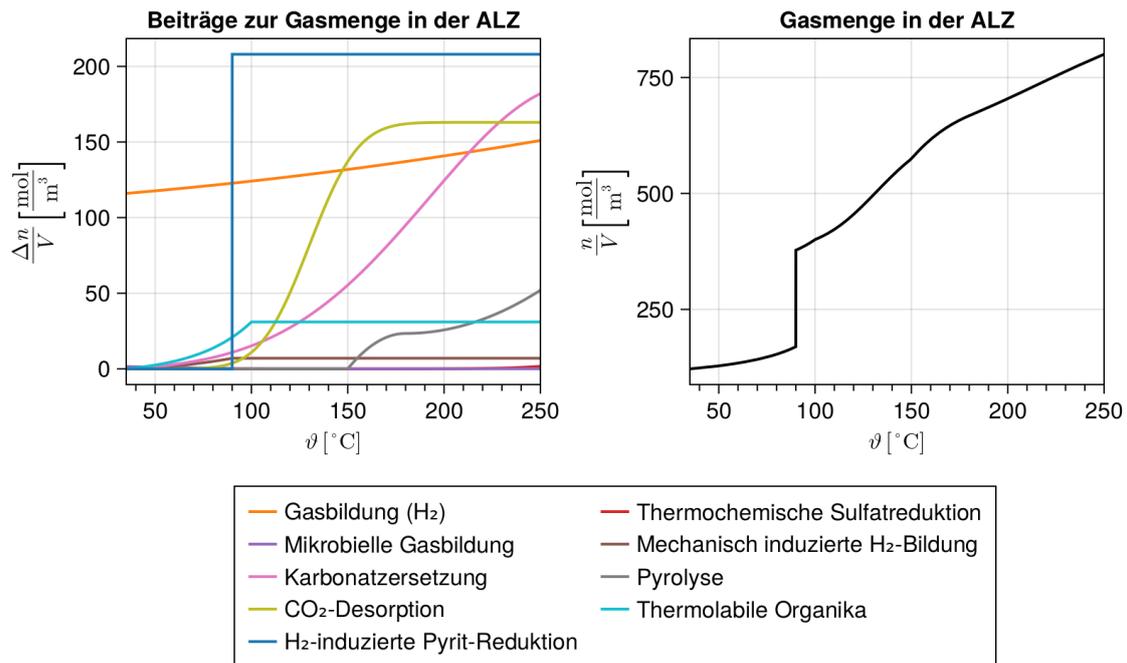
Bei der Korrosion des Behälters durch H<sub>2</sub>S entsteht 1 Mol H<sub>2</sub> pro 1 Mol verbrauchtes H<sub>2</sub>S. Da der Beitrag des H<sub>2</sub>S zur Gasmenge in den vorangehend diskutierten TUF bereits berücksichtigt wurde, erfolgt hier keine gesonderte Ableitung des Beitrages der TUF „Korrosionsrate durch H<sub>2</sub>S“ zur Gasmenge.



**Abb. 5.17** Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Gasmenge (links) und resultierende Gasmenge im Versatz (rechts) (ohne Pyrit)



**Abb. 5.18** Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Gasmenge (links) und resultierende Gasmenge im Versatz (rechts) (mit Pyrit)

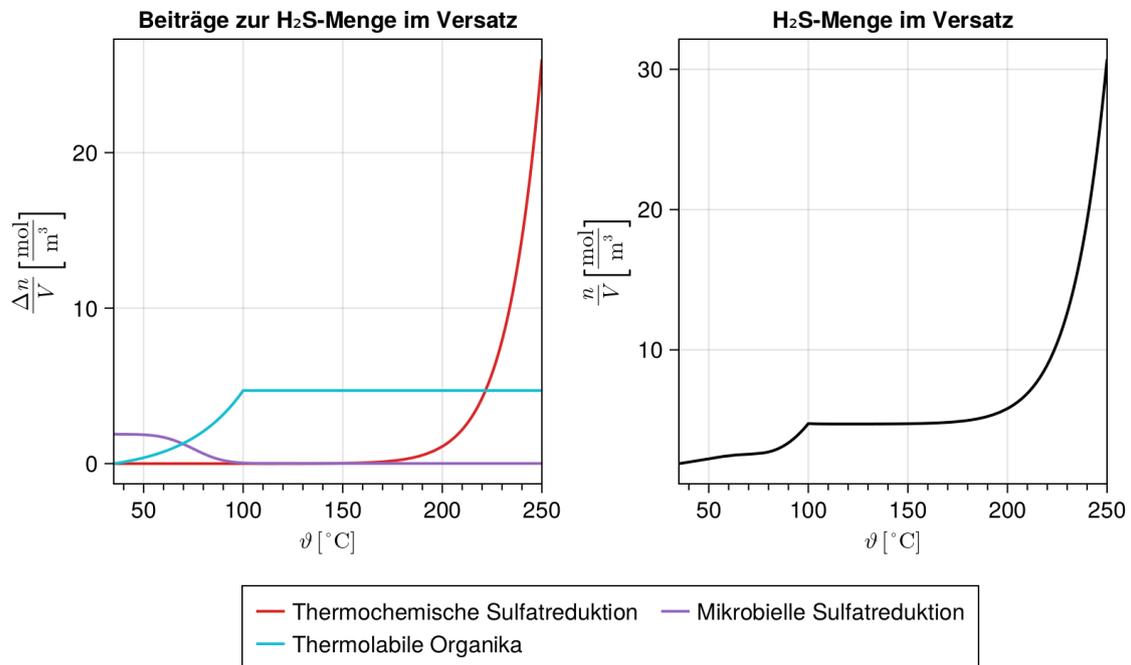


**Abb. 5.19** Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Gasmenge in der ALZ (links) und resultierende Gasmenge in der ALZ (rechts)

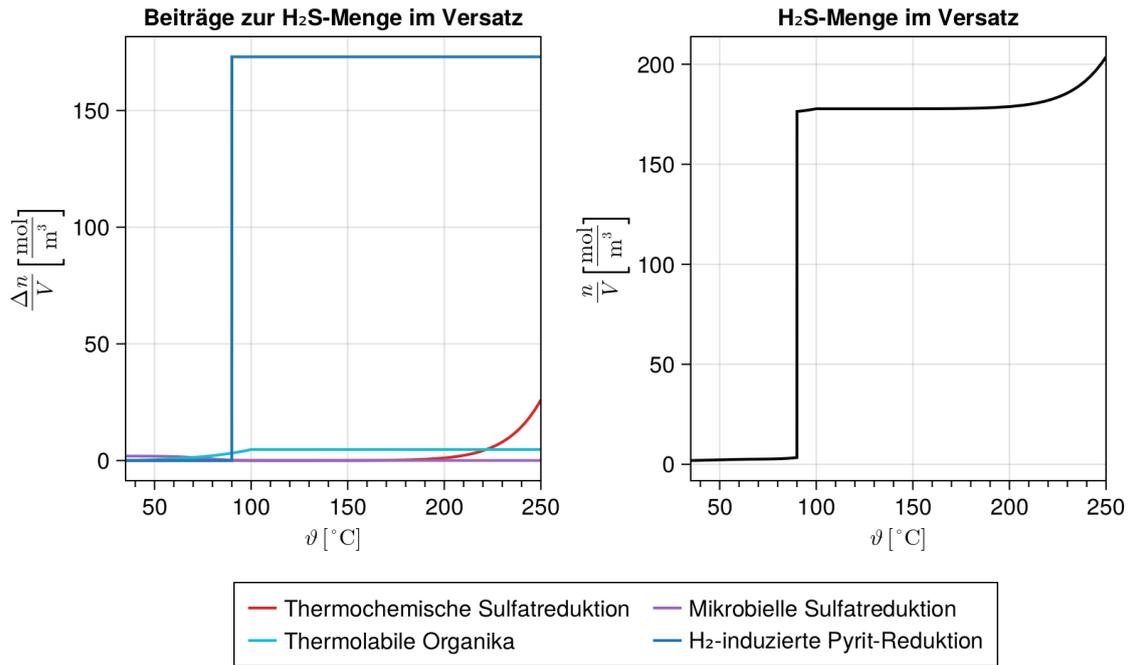
#### 5.2.4 H<sub>2</sub>S-Menge

Die Bilanzierungsgröße „H<sub>2</sub>S-Menge“ setzt sich aus den Beiträgen der primären TUF „Mikrobielle Sulfatreduktion“, „Thermochemische Sulfatreduktion“, „Thermolabile Organika“ und „H<sub>2</sub>-induzierte Pyrit-Reduktion“ zusammen. Die maximalen Beiträge dieser TUF wurden im vorangehenden Abschnitt abgeleitet und betragen bezogen auf 1 m<sup>3</sup> Ton zunächst jeweils 1,9 Mol, 26 Mol, 4,7 Mol und 173 Mol im Versatz (Abb. 5.21) sowie 0,6 Mol, 1,7 Mol, 5,7 Mol und 208 Mol in der ALZ (Abb. 5.22). Für einen Versatz mit einem vernachlässigbaren Pyrit-Gehalt entfällt die primäre TUF „H<sub>2</sub>-induzierte Pyrit-Reduktion“ (Abb. 5.20). Ein Teil dieser H<sub>2</sub>S-Menge – bis zu ca. 0,1 Mol pro kg Bentonit /PED 17/ bzw. 189 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton im Versatz – kann eine Reaktion mit dem Fe(III) in der Mineralstruktur der Smektiten eingehen (s. die abgeleitete TUF „Quellfähigkeit“ im Kapitel 5.3.2) und steht daraufhin nicht mehr der Korrosionsreaktion mit dem Behälter zur Verfügung. Aufgrund des deutlich geringeren Gehaltes an quellfähigen Smektiten und Chloriten als im Bentonit von bis zu maximal 10 % /JAH 16/, werden nur 28 Mol H<sub>2</sub>S pro 1 m<sup>3</sup> Ton durch diese Reaktion in der ALZ verbraucht. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass die restliche H<sub>2</sub>S-Menge (188 Mol pro 1 m<sup>3</sup> Ton) den Behälter diffusiv erreichen und eine Korrosionsreaktion eingehen kann /PED 17/, /PEK 19/. Diese der Korrosion im Versatz zur Verfügung stehende H<sub>2</sub>S-Menge (s. die abgeleitete TUF

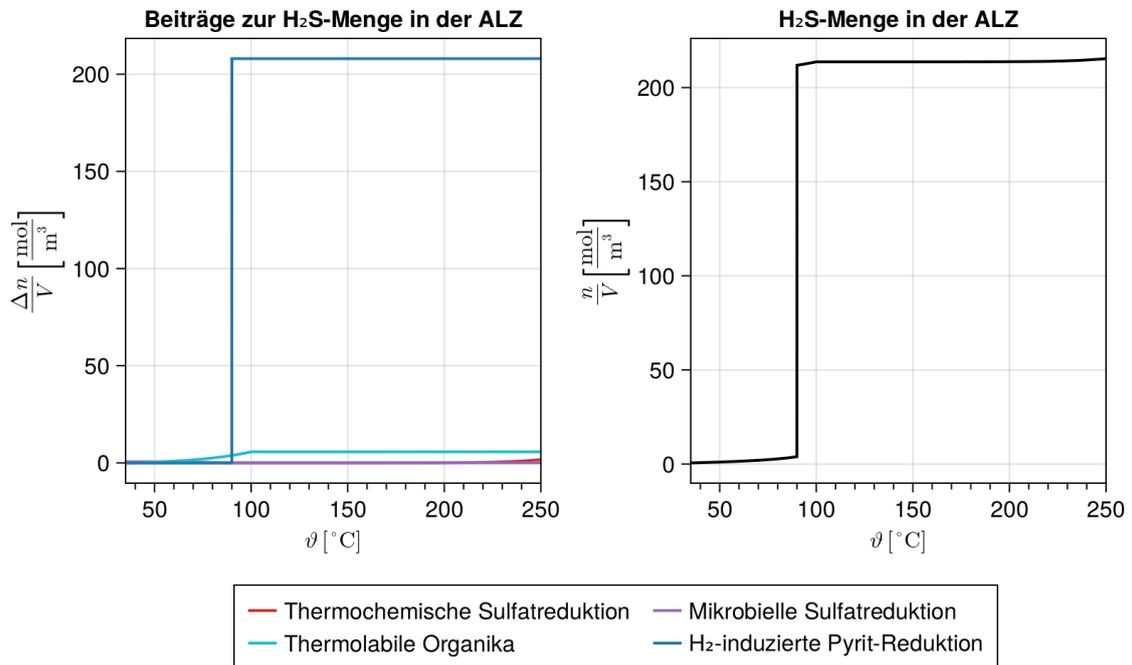
„Korrosion durch H<sub>2</sub>S“ im Kapitel 5.3.1) beträgt bezogen auf 1 m<sup>3</sup> Ton dementsprechend 205 Mol und setzt sich aus den Beiträgen der primären TUF „Mikrobielle Sulfatreduktion“, „Thermochemische Sulfatreduktion“, „Thermolabile Organika“ und „H<sub>2</sub>-induzierte Pyrit-Reduktion“ von jeweils 1,9 Mol, 26 Mol, 4,7 Mol und 172 Mol zusammen.



**Abb. 5.20** Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur H<sub>2</sub>S-Menge (links) und resultierende H<sub>2</sub>S-Menge (rechts) im Versatz (ohne Pyrit)



**Abb. 5.21** Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur H<sub>2</sub>S-Menge (links) und resultierende H<sub>2</sub>S-Menge (rechts) im Versatz (mit Pyrit)



**Abb. 5.22** Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur H<sub>2</sub>S-Menge (links) und resultierende H<sub>2</sub>S-Menge (rechts) in der ALZ

### 5.3 Abgeleitete TUF

Abgeleitete TUF werden entweder (i) direkt bzw. durch Multiplikation mit Bilanzierungsgrößen aus den primären integritätsrelevanten TUF oder (ii) durch Einsetzen in physikalische Gesetze aus den primären RN-transportrelevanten TUF, Bilanzierungsgrößen und den primären integritätsrelevanten TUF abgeleitet (Tab 5-4). Dabei werden die primären TUF, die zwar unterschiedliche Prozesse abbilden, jedoch die gleiche Eigenschaft einer Komponente beeinflussen (z. B. die Quellfähigkeit im Ton oder die Wandstärke des Behälters), in einer abgeleiteten TUF als eine gewichtete Summe zusammengefasst (s. Tab. 5.4).

Eine kennzeichnende Eigenschaft der abgeleiteten TUF ist, dass sie zwecks Verwendung im folgenden Schritt der hier vorgestellten Methode – der Ableitung der GTUF – anschließend auf einen Wertebereich von 0 bis 1 verschoben und skaliert und als dimensionslos betrachtet werden. In dieser Abstraktion besteht eine der entscheidenden Vereinfachungen, die hier zwecks Ermittlung der Temperaturunverträglichkeit aus der komplexen Zusammenwirkung aller in der vorangehenden Priorisierung als relevant erachteter Prozesse in den untersuchten Komponenten des Nahfeldes vorgenommen wurde. Der Wert „0“ wird bei der Temperatur angenommen, für die bezüglich des jeweiligen Prozesses die geringste Temperaturunverträglichkeit erwartet wird. Entsprechend wird der Wert 1 bei maximaler Temperaturunverträglichkeit angenommen. Daraus ergibt sich insbesondere, dass der Wertebereich  $[0, 1]$  der TUF „voll ausgeschöpft“ wird, sodass ein sinnvoller Vergleich der dimensionslosen TUF möglich wird. Dieses Verfahren ist notwendig, weil bei der Addition von abgeleiteten TUF in einer GTUF die Temperaturabhängigkeiten von untereinander nicht direkt vergleichbaren Eigenschaften (z. B. die Quellfähigkeit und der Fluiddruck im Ton) erfolgt. Im Gegensatz dazu werden bei einer gewichteten Addition von primären TUF zu einer abgeleiteten TUF die Beiträge einzelner primärer TUF aufgrund der Beeinflussung der gleichen Komponenteneigenschaft anhand des Beeinflussungsgrades dieser Eigenschaft in Relation zueinander gesetzt.

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

**Tab. 5.4** Abgeleitete TUF für das Wirtsgestein Tongestein

<b>Abgeleitete TUF</b>	<b>Komponente</b>	<b>Art der Ableitung aus primären TUF und Bilanzierungsgrößen</b>
Korrosion	WP.00	Gewichtete Summe „Diffusion (Lösung)“ mit Berücksichtigung der temperaturabhängigen Beiträge durch „Mikrobielle Sulfatreduktion“, „Methanogenese“ und „Fermentation“ und „H <sub>2</sub> S Menge“
Quellfähigkeit	BB.01/ HR.01/ HR.02	Gewichtete Summe von „Smektit-Illitisation“, „Quarzzementation“, „Mikrobielle Eisenreduktion“, „Mikrobielle Sulfatreduktion“, „Thermochemische Sulfatreduktion“, „H <sub>2</sub> -induzierte Pyrit-Reduktion“, „Thermolabile Organika“ und „Wasserdampfeinwirkung“ (nur BB.01)
Fluiddruckänderung	BB.01/ HR.01/ HR.02	Summe von „Lösungsdruck“ und dem Produkt von „Gasdruck“, „Gasmenge“ und reziproker „Porosität“
Advektion / Dispersion (Lösung)	BB.01/ HR.01/ HR.02	Multiplikation von Durchlässigkeitsbeiwert („Permeabilität“ * „Dichte“ / „Viskosität“) mit „Lösungsdruck“
Advektion / Dispersion (Gas)	BB.01/ HR.01/ HR.02	Multiplikation von Durchlässigkeitsbeiwert („Permeabilität“ * „Dichte“ / „Viskosität“) mit „Gasdruck“ mit „Gasmenge“
Diffusion (Lösung)	BB.01/ HR.01/ HR.02	Multiplikation von „Diffusionskoeffizient“ mit „Porosität“
Diffusion (Gas)	BB.01/ HR.01/ HR.02	Multiplikation von „Diffusionskoeffizient“ mit „Porosität“ und „Gasmenge“

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

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

<b>Primäre TUF</b>	<b>Bilanzierungsgröße</b>	<b>abgeleitete TUF</b>
<i>integritätsrelevante TUF</i>		
Quellen	Porosität	–
Konsolidierung	Porosität	–
Smektit-Illitisierung	Porosität	Quellfähigkeit
Wasserdampfeinwirkung	–	Quellfähigkeit
Quarzzementation	Porosität	Quellfähigkeit
Mikrobielle Eisenreduktion	Gasmenge	Quellfähigkeit
Mikrobielle Sulfatreduktion	Gasmenge, H <sub>2</sub> S-Menge	Korrosion, Quellfähigkeit
Methanogenese	Gasmenge	Korrosion
Fermentation	Gasmenge	Korrosion
Karbonatzersetzung	Porosität, Gasmenge	Quellfähigkeit (Variante 1)
Mineralumwandlung	Porosität	–
Thermochemische Sulfatreduktion	Gasmenge, H <sub>2</sub> S-Menge	Quellfähigkeit
Lösungsdruck	–	Fluiddruckänderung, Advektion / Dispersion (Lösung)
Gasdruck	–	Fluiddruckänderung, Advektion / Dispersion (Gas)
Mechanisch induzierte H <sub>2</sub> -Bildung	Gasmenge	–
Pyrolyse	Porosität, Gasmenge	–
Thermolabile Organika	Gasmenge, H <sub>2</sub> S-Menge	–
CO <sub>2</sub> -Desorption	Gasmenge	–
H <sub>2</sub> -induzierte Pyrit-Reduktion	Gasmenge, H <sub>2</sub> S-Menge	–
Karbonatisierung	Porosität, Gasmenge	–

<b>Primäre TUF</b>	<b>Bilanzierungsgröße</b>	<b>abgeleitete TUF</b>
Betonkorrosion	Porosität	–
Rissbildung im Beton	Porosität	–
Korrosionsrate	–	–
Korrosionsrate durch H <sub>2</sub> S	–	–
Versprödungsrate	–	–
<b><i>RN-transportrelevante TUF</i></b>		
Viskosität	–	Advektion / Dispersion (Lösung), Advektion / Dispersion (Gas)
Dichte	–	Advektion / Dispersion (Lösung)
Rückhaltung	–	–
Diffusionskoeffizient	–	Korrosion, Mikrobiell beeinflusste Korrosion, Diffusion (Lösung), Diffusion (Gas)
RN-Konzentration	–	–
Thermische Osmose	–	–

Die Entscheidung über die Notwendigkeit der Ableitung der abgeleiteten TUF aus den primären integritätsrelevanten TUF zur mikrobiellen Aktivität sowie „Gasdruck“ oder „Korrosionsrate durch H<sub>2</sub>S“ durch Multiplikation mit Bilanzierungsgrößen „Gasmenge“ bzw. „H<sub>2</sub>S-Menge“ begründete sich mit dem Argument, dass diese primäre TUF nur dann eine Wirkung entfalten können, wenn der bzw. das durch die entsprechende Bilanzierungsgröße abgebildete Wirkstoff bzw. -medium zur Verfügung steht. Z. B. kann eine „Gasdruckänderung“ (abgeleitete TUF) aus der „Gasdruck“-Temperaturabhängigkeit (primäre TUF) nur beim Vorliegen des Mediums Gas abgeleitet (Bilanzierungsgröße „Gasmenge“) werden.

Auch das Auftreten und die Ausprägung der durch die entsprechenden abgeleiteten TUF abgebildeten RN-Transport-Prozesse Advektion, Dispersion und Diffusion in den RN-

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

$$k(\phi) \approx \frac{\phi^3}{(1-\phi)^2} \quad (5.28)$$

ermittelt.

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

### 5.3.1 Korrosion

Die abgeleitete TUF „Korrosion“ bezieht sich auf sämtliche anaerobe Korrosionsprozesse am Behälter, die zur Reduzierung seiner Wandstärke beitragen, d. h. auch die, die durch Mikroben oder H<sub>2</sub>S verursacht sind. Die Korrosion wird einerseits wesentlich

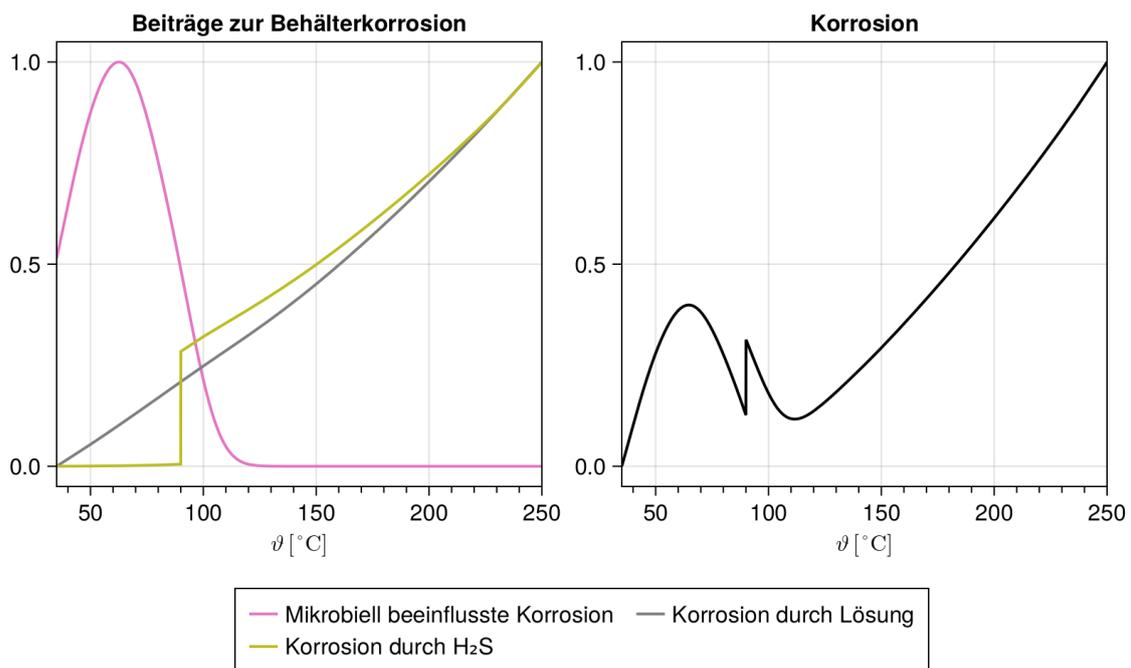
durch die Lösung beeinflusst, für die im ELS im Ton davon ausgegangen werden kann, dass sie unabhängig von der Temperatur unbegrenzt zur Verfügung steht. Andererseits wird die Korrosion in einem porösen Medium wie Ton durch den langsameren als die Korrosionsreaktion selbst diffusiven Abtransport ihres Produktes  $Fe^{2+}$  (unter anoxischen Bedingungen) bestimmt, wie in einem 76-monatigen Laborversuch festgestellt wurde /SCH 19/, /SCH 21/. Die theoretische Grundlage für den Einfluss des diffusiven Abtransportes des  $Fe^{2+}$  durch das poröse Medium, in welches das korrodierende Metall eingebettet ist, wurde in der Arbeit /STE 19/ präsentiert. Diese Arbeit zeigt, dass aufgrund der Abhängigkeit des reversiblen Potentials der Korrosionsreaktion  $Fe \rightarrow Fe^{2+} + 2e^-$  von der  $Fe^{2+}$ -Konzentration in der an Metall angrenzenden Porenlösung, die Rate der Korrosionsreaktion unterhalb eines bestimmten Schwellenwerts der Porosität, der z. B. für zementbasierte Materialien bei 18,5 % liegt /STE 19/, durch den langsameren diffusiven Abtransport des  $Fe^{2+}$  deutlich reduziert wird. Oberhalb dieses Schwellenwertes verläuft die Korrosionsreaktion zunehmend wie in einer Lösung. Die abgeleitete TUF „Korrosion“ gemäß Abb. 5.23 wird daher nicht aus der primären TUF „Korrosionsrate“ (Gleichung (20)) abgeleitet, sondern aus der abgeleiteten TUF „Diffusion (Lösung)“ (siehe das gleichnamige Unterkapitel 5.3.6). Die Verfügbarkeit des für diesen Korrosionsprozess notwendigen Wassers wird als temperaturunabhängig und unbegrenzt angenommen (siehe hierzu die Diskussion zur Bilanzierungsgröße „Lösungsmenge“ im Unterkapitel 5.2.2).

Für die Ableitung der abgeleiteten TUF „Korrosion“ wird – wie vorangehend diskutiert – nicht die primäre TUF „Korrosionsrate durch  $H_2S$ “ (Gleichung (21)), sondern die abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ verwendet. Die Korrosion durch  $H_2S$  setzt allerdings die temperaturabhängige Verfügbarkeit des  $H_2S$  voraus. Daher wird die abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ mit der temperaturabhängigen Bilanzierungsgröße multipliziert. Es sei angemerkt, dass in diesem Fall nicht nur das  $Fe^{2+}$  diffusiv abtransportiert, sondern zusätzlich das  $H_2S$  zum Behälter diffusiv transportiert werden müssen /PED 17/, /PEK 19/.

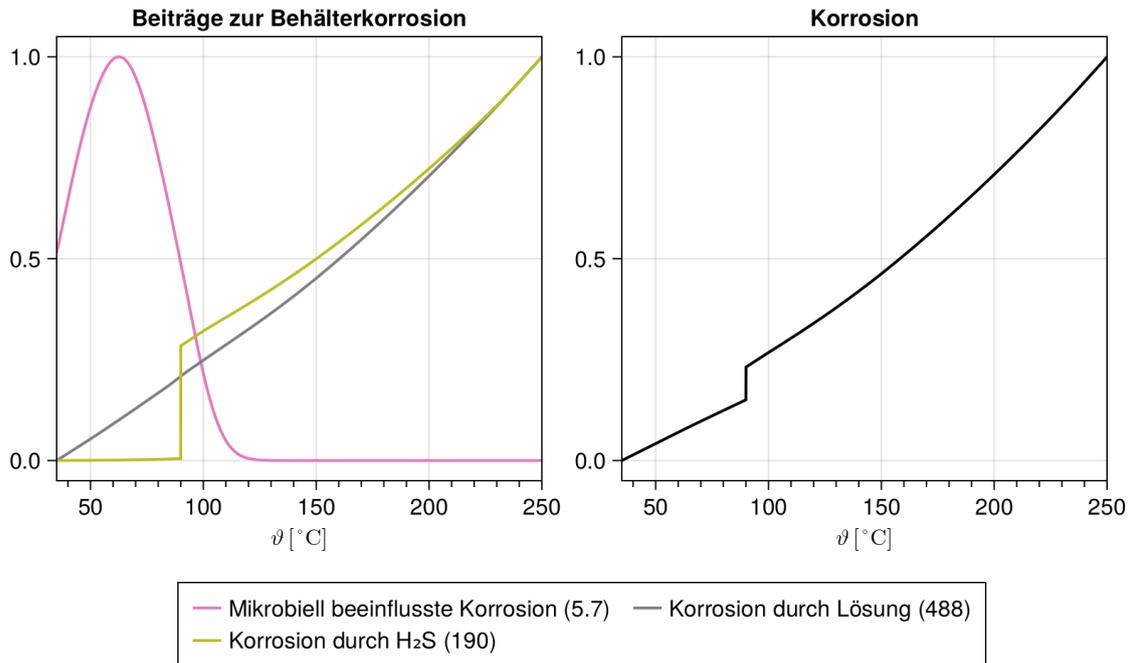
Mikrobiell beeinflusste Korrosionsprozesse hängen von der temperaturabhängigen Verfügbarkeit der mikrobiell produzierten organischen Säuren, Nitrat,  $H_2S$ , extrazellulären Polymere oder von einer temperaturabhängigen direkten anaeroben Eisenoxidation ab. Daher wird hier die abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ – wie vorangehend diskutiert anstelle der primären TUF „Korrosionsrate“ – mit den primären TUF „Mikrobielle Sulfat-reduktion“ (Gleichung (8)), „Methanogenese“ (Gleichung (9)) und „Fermentation“

(Gleichung (10)) multipliziert. Es sei angemerkt, dass im Fall einiger mikrobiell beeinflusster Korrosionsprozesse nicht nur das  $\text{Fe}^{2+}$  vom Behälter diffusiv abtransportiert, sondern zusätzlich u. A. organische Säuren und Nitrat zum Behälter diffusiv transportiert werden müssen.

Es wurden für diese abgeleitete TUF, die sich aus den oben genannten primären TUF als eine gewichtete Summe zusammensetzt, zwei Varianten betrachtet. In der ersten wurde keine prozessspezifische Gewichtung vorgenommen, so dass alle Gewichte gleich 1 sind (Abb. 5.23). In der zweiten Variante entsprechen die Gewichte für die beitragenden primären TUF den maximalen Beiträgen dieser TUF zur Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ (Abb. 5.24), weil der Metallmasseverlust des Behälters und somit die Abnahme seiner Wandstärke in einem direkten Zusammenhang mit dem aufgrund des Korrosionsprozesses produzierten  $\text{H}_2$ -Gases steht, so dass z. B. 1 Mol  $\text{H}_2\text{S}$  bei der Wechselwirkung mit dem Metall des Behälters 1 Mol  $\text{H}_2$  produziert.



**Abb. 5.23** Beitragende primäre TUF (Beiträge gleich gewichtet; links) zur abgeleiteten TUF „Korrosion“ (rechts)



**Abb. 5.24** Beitragende primäre TUF (Gewichte in Legende entsprechend der Gas-  
mengenbilanzierung; links) zur abgeleiteten TUF „Korrosion“ (rechts)

### 5.3.2 Quellfähigkeit

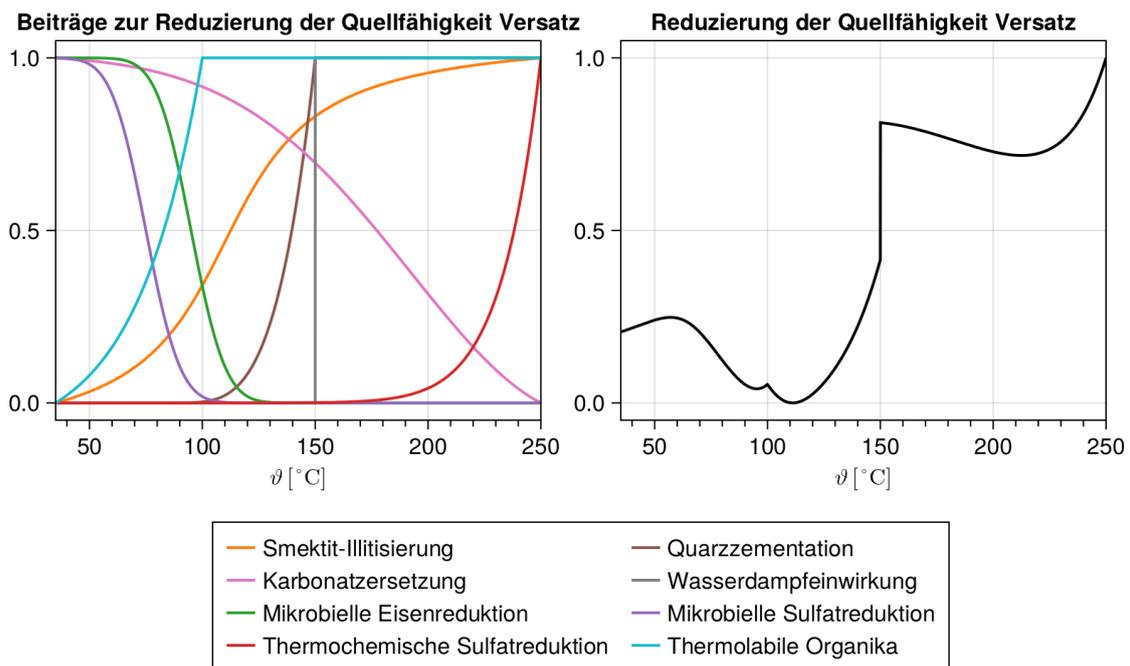
Die abgeleitete TUF „Quellfähigkeit“ ergibt sich als gewichtete Summe aller primären TUF, die die Quellfähigkeit tonhaltiger Materialien beeinflussen. Eine Zusammenfassung zu dieser abgeleiteten TUF erfolgte aufgrund der Beeinflussung der gleichen Eigenschaft der Tonkomponenten. Dadurch kann die Gewichtung der einwirkenden Prozesse direkt auf das Merkmal „Quellfähigkeit“ abgestimmt werden. Es wurden bei dieser Gewichtung zwei Vorgehensweisen angewendet.

In der ersten Variante wurde keine prozessspezifische Gewichtung vorgenommen, so dass alle Gewichte gleich 1 sind, und es wurde angenommen, dass die Quellfähigkeit durch die Karbonatzersetzung positiv beeinflusst wird (Abb. 5.25, Abb. 5.26, Abb. 5.27). Diese Annahme gründet auf der allgemeinen Beobachtung, dass sich die Steifigkeit und die Festigkeit eines Tongesteins mit dem steigenden Karbonatgehalt und der dadurch steigenden Karbonatzementierung der Tonaggregate ändert /VOL 04/, /KLI 09/. Allerdings zeigt diese Abhängigkeit keinen eindeutigen Trend, z. B. nimmt die Bruchfestigkeit des Opalinustons mit dem steigenden Karbonatgehalt ab, während sie für den Callovo-Oxfordian-Ton dabei zunimmt /KLI 09/. Dies wird auf den Einfluss der Korngrößenverteilung der Karbonate, der Form der Karbonatkörner und ihrer räumlichen Verteilung

zurückgeführt /KLI 09/, /GEN 13/. Auch die Karbonatzementierung selbst wird z. B. nur in der sandigen Fazies des Opalinustons jedoch nicht in seiner tonigen Fazies beobachtet /KAU 13/, /KNE 21/. Da mechanische Eigenschaften von Tongesteinen vom Karbonatgehalt im Allgemeinen abhängen /GEN 13/, kann auch für ihr Quellverhalten diese Abhängigkeit angenommen werden. Allerdings konnte in der verfügbaren aktuellen Literatur nur eine Studie gefunden werden, die das systematisch untersucht und eine abnehmende Quellfähigkeit eines Tons mit steigendem Kalziumkarbonatgehalt nachgewiesen hat /AVS 05/. Es wird entsprechend diesen Argumenten in der ersten Variante ein positiver Einfluss der Karbonatzersetzung auf die Quellfähigkeit des Tongesteins (ALZ und ewG) sowie des Versatzes (für den Fall, dass dieser aus Ausbruchsmaterial besteht) angenommen.

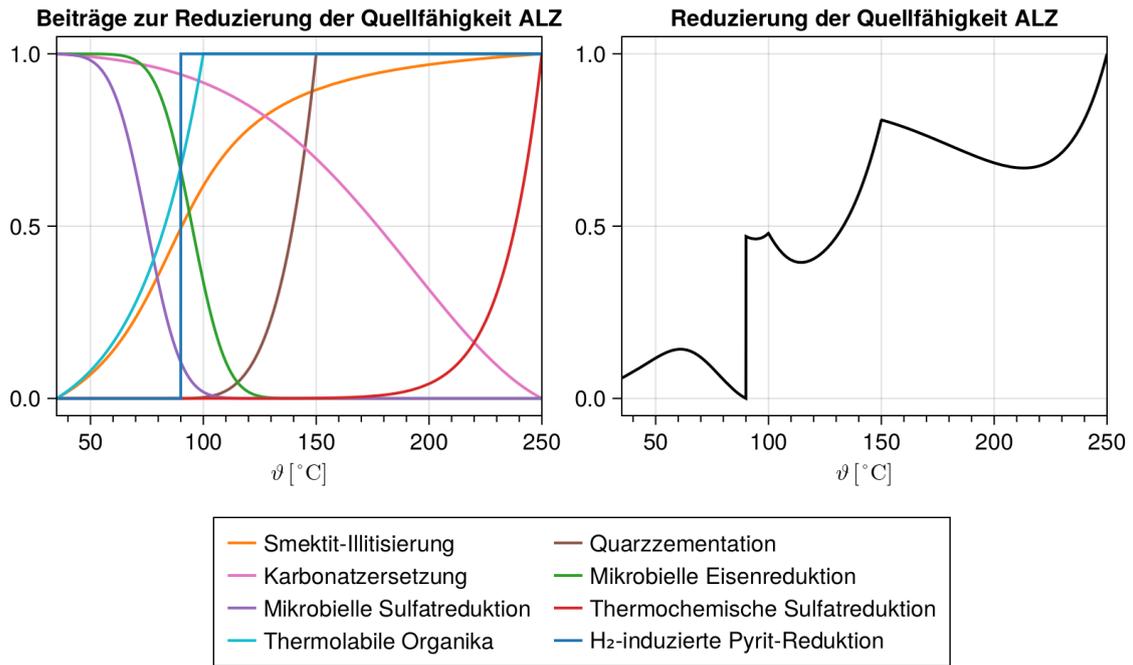
In der zweiten Variante entsprechen die Gewichte für die beitragenden primären TUF „Mikrobielle Sulfatreduktion“, „Thermochemische Sulfatreduktion“, „H<sub>2</sub>-induzierte Pyrit-Reduktion“, „Thermolabile Organika“ den maximalen Beiträgen dieser TUF zur Bilanzierungsgröße „H<sub>2</sub>S-Menge“ (Abb. 5.28, Abb. 5.29, Abb. 5.30). Dies begründet sich darin, dass H<sub>2</sub>S, wie zu dieser Bilanzierungsgröße oben diskutiert wurde, eine Reaktion mit Fe(III) in der oktaedrischen Schicht der Mineralstruktur der quellfähigen Minerale eingehen und dadurch ihre Quellfähigkeit verringern kann. Um diese Prozesse in Relation zu den Prozessen, die durch die beitragenden primären TUF „Smektit-Illitisierung“, „Quarzzementation“ und „Wasserdampfeinwirkung“ (nur BB.01) abgebildet werden, zu setzen, werden die Gewichte für diese drei TUF gleich gesetzt und in erster Näherung als Menge Fe(III) in der oktaedrischen Schicht der Mineralstruktur der quellfähigen Minerale (bezogen auf 1 m<sup>3</sup> Ton wie auch bei der Bilanzierungsgröße „H<sub>2</sub>S-Menge“) abgeleitet. Dies begründet sich darin, dass bei der Smektit-Illitisierung die oktaedrischen Schichten der Smektite durch Substitutionen Fe(III) verlieren, so dass die oktaedrischen Kationen der entstehenden Illite in einem erheblich größerem Ausmaß durch Al(III) vertreten sind. In diesem Sinne stellt die Menge Fe(III) in der oktaedrischen Schicht der Mineralstruktur ein Merkmal für die Quellfähigkeit des Tons dar und kann zur Gewichtung des durch die primäre TUF „Smektit-Illitisierung“ abgebildeten Prozesses herangezogen werden. Der durch die primäre TUF „Quarzzementation“ abgebildete Prozess resultiert aus der Smektit-Illitisierungsreaktion und wird daher mit der gleichen Gewichtung versehen. Der durch die primäre TUF „Wasserdampfeinwirkung“ abgebildete Prozess hängt mit dem Gehalt an Smektiten zusammen und wird aus diesem Grund ebenfalls mit der Menge Fe(III) in der oktaedrischen Schicht der Mineralstruktur gewichtet. Diese Menge beträgt

284 Mol in der ALZ und 15164 Mol im Versatz.<sup>7</sup> In dieser Variante wird kein Einfluss der Karbonatzerersetzung auf die Quellfähigkeit des Tongesteins angenommen, weil (i) der Stand des Wissens zum hier für die ALZ und den ewG beispielhaft betrachteten Opalinuston dazu keine begründete Aussage zulässt und (ii) der Versatz aus dem beispielhaft betrachteten Bentonit besteht, in dem der Einfluss der Karbonatminerale auf das Quellverhalten aufgrund ihres geringen Gehaltes (im niedrigen einstelligen Prozentbereich) /UFE 08/, /KAU 12/ vernachlässigt werden kann.

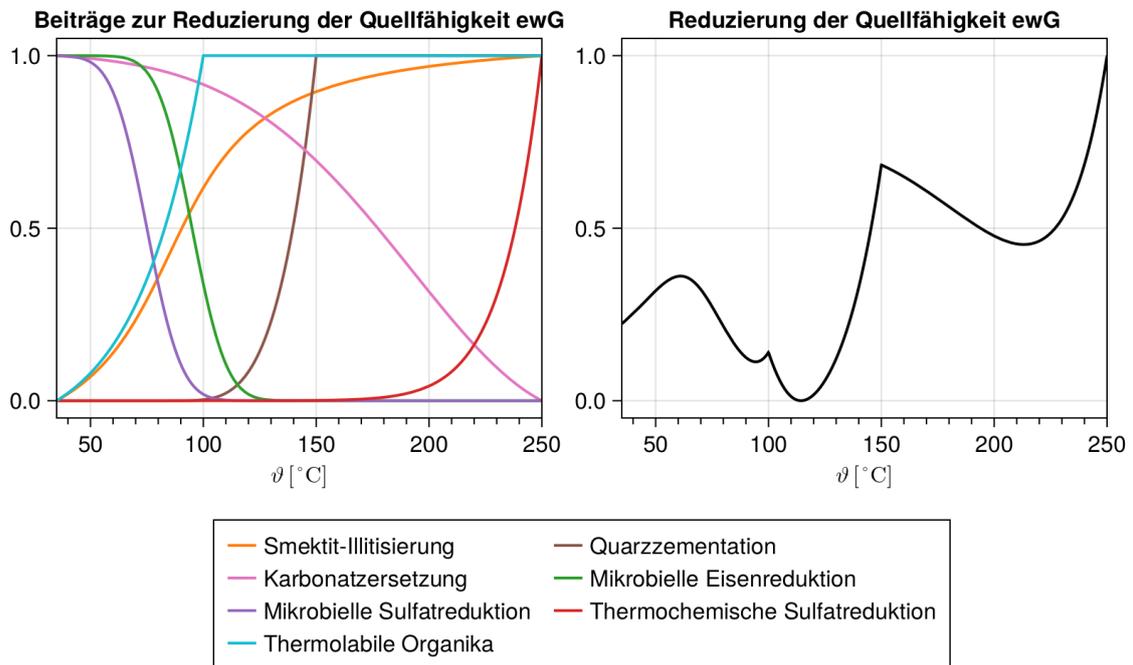


**Abb. 5.25** Beitragende primäre TUF (Beiträge gleich gewichtet; links) zur abgeleiteten TUF „Quellfähigkeit“ im Versatz (rechts)

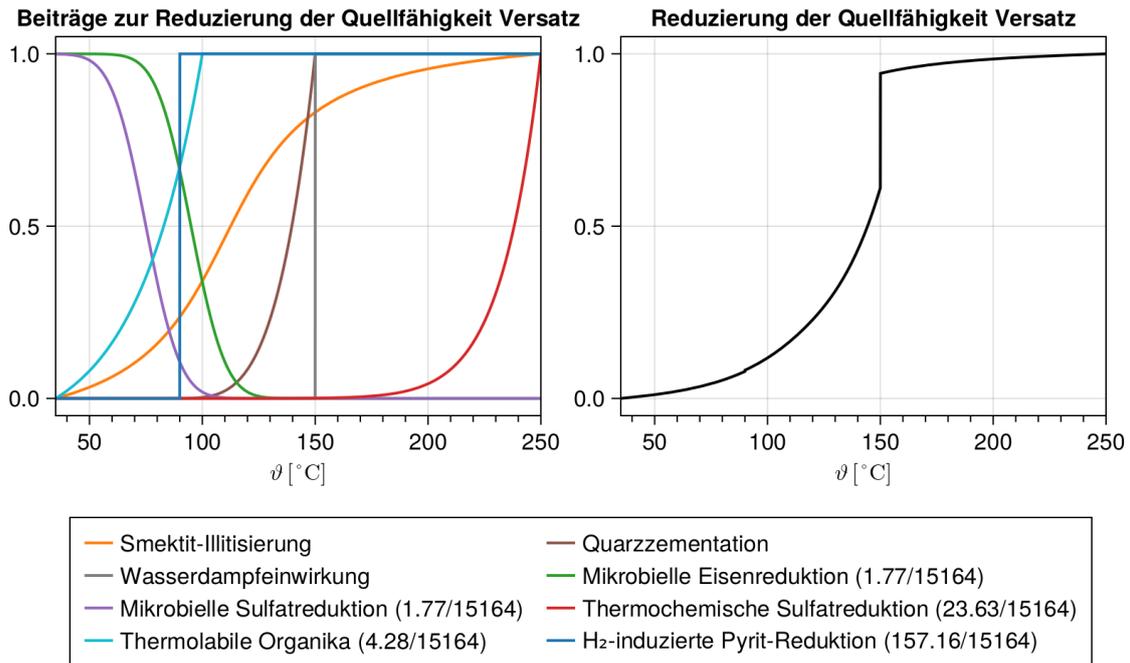
<sup>7</sup> S. Datenblatt „Berechnungen-Ton“ in der Datenbank zur detaillierten Ableitung der Gewichte.



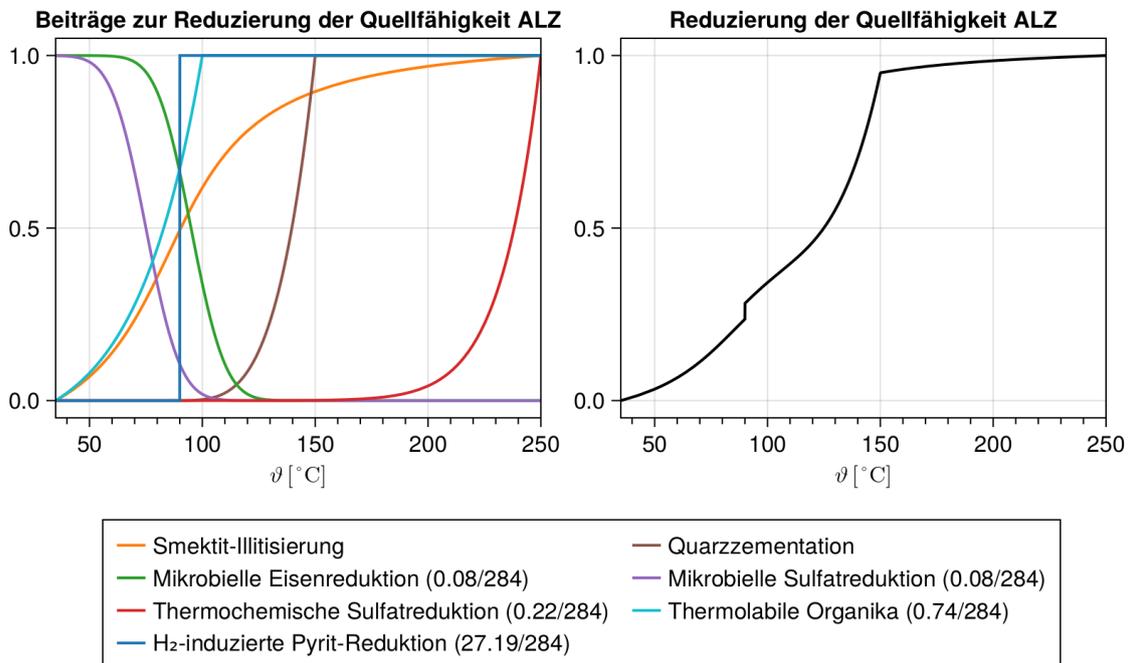
**Abb. 5.26** Beitragende primäre TUF (Beiträge gleich gewichtet; links) zur abgeleiteten TUF „Quellfähigkeit“ in der ALZ (rechts)



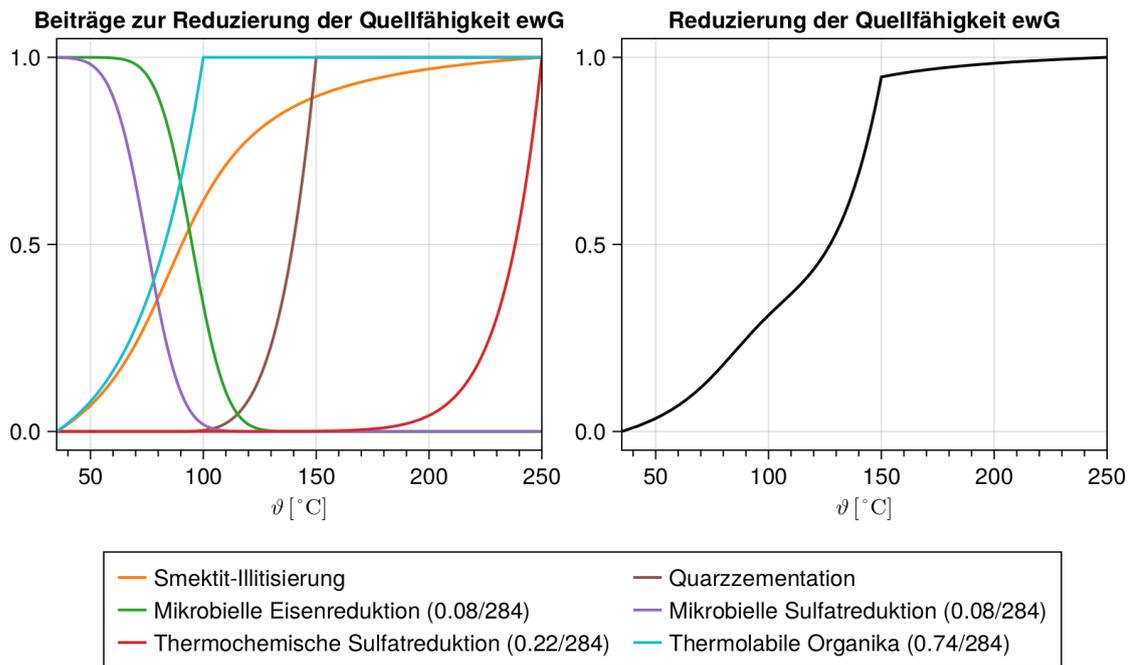
**Abb. 5.27** Beitragende primäre TUF (Beiträge gleich gewichtet; links) zur abgeleiteten TUF „Quellfähigkeit“ im ewG (rechts)



**Abb. 5.28** Beitragende primäre TUF (Gewichte in Legende entsprechend der H<sub>2</sub>S-Mengenbilanzierung; links) zur abgeleiteten TUF „Quellfähigkeit“ im Versatz (rechts)



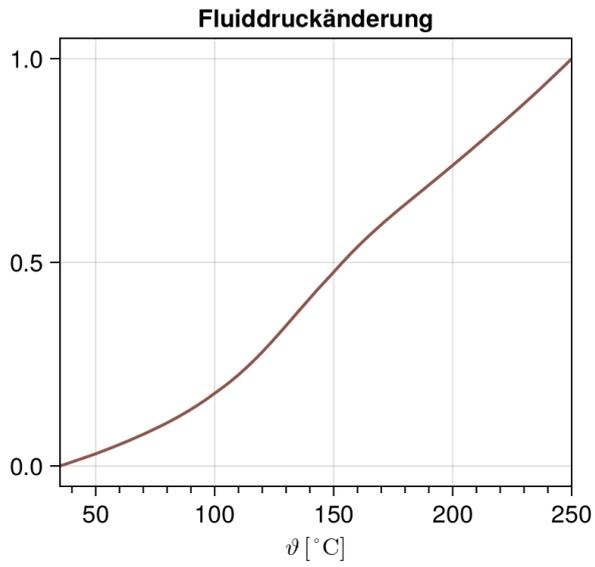
**Abb. 5.29** Beitragende primäre TUF (Gewichte in Legende entsprechend der H<sub>2</sub>S-Mengenbilanzierung; links) zur abgeleiteten TUF „Quellfähigkeit“ in der ALZ (rechts)



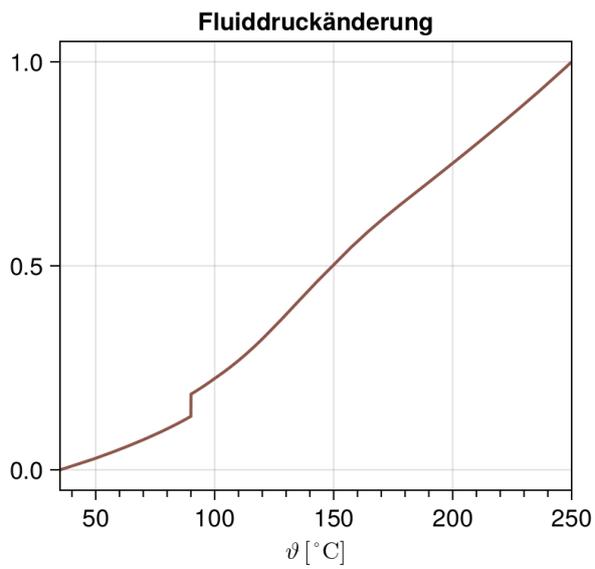
**Abb. 5.30** Beitragende primäre TUF (Gewichte in Legende entsprechend der  $H_2S$ -Mengenbilanzierung; links) zur abgeleiteten TUF „Quellfähigkeit“ im ewG (rechts)

### 5.3.3 Fluiddruckänderung

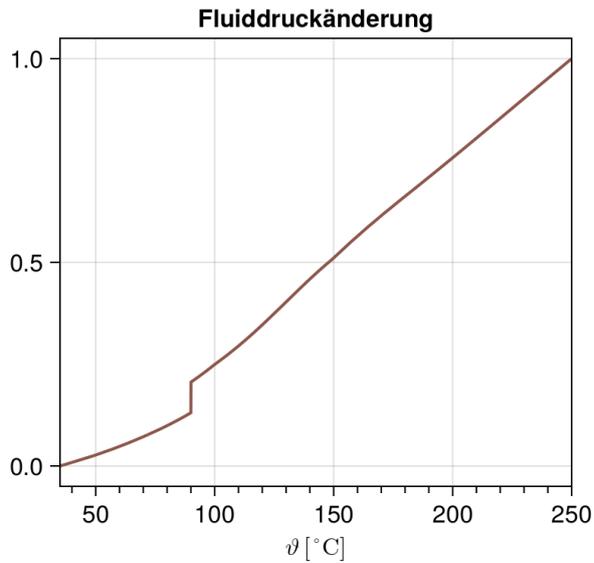
Die abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ stellt die Beeinflussung des Lösungs- und Gasdruckes im Endlagersystem durch temperaturbedingte Druckänderung sowie aufgrund der Porositätsänderung, bei der das Korngerüst auf die Porenfluide positiven oder negativen Druck ausübt, dar. Die Druckänderung der Lösung wird direkt durch die primäre TUF „Lösungsdruck“ (Gleichung (13)) dargestellt. Die Gasdruckänderung wird als Produkt der Bilanzierungsgröße „Gasmenge“, der reziproken Bilanzierungsgröße „Porosität“ sowie der primären TUF „Gasdruck“ (Gleichung (14)) bestimmt. Die abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ ergibt sich im Versatz und in der ALZ als Summe von Lösungs- und Gasdruckänderungen (Abb. 5.31, Abb. 5.32, Abb. 5.33). Im Versatz wird wieder eine Variante ohne Pyrit (Abb. 5.31) und eine Variante mit Pyrit (Abb. 5.32) unterschieden, da die berücksichtigten Bilanzierungsgrößen „Gasmenge“ und „Porosität“ davon beeinflusst werden. Da im ewG keine freie Gasphase angenommen wird, beinhaltet die TUF „Fluiddruckänderung“ dort nur die Lösungsdruckänderung (Abb. 5.34).



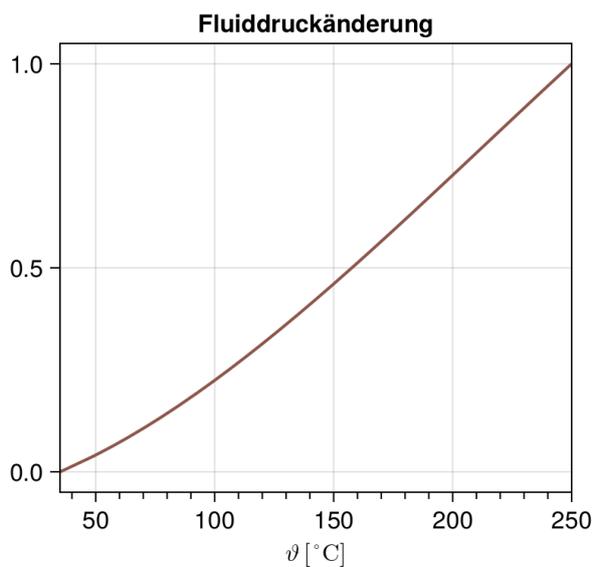
**Abb. 5.31** Abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ im Versatz (ohne Pyrit)



**Abb. 5.32** Abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ im Versatz (mit Pyrit)



**Abb. 5.33** Abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ in der ALZ

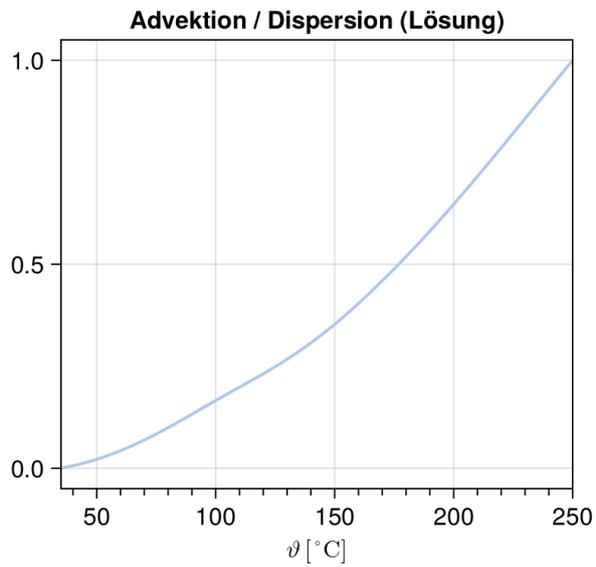


**Abb. 5.34** Abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ im ewG

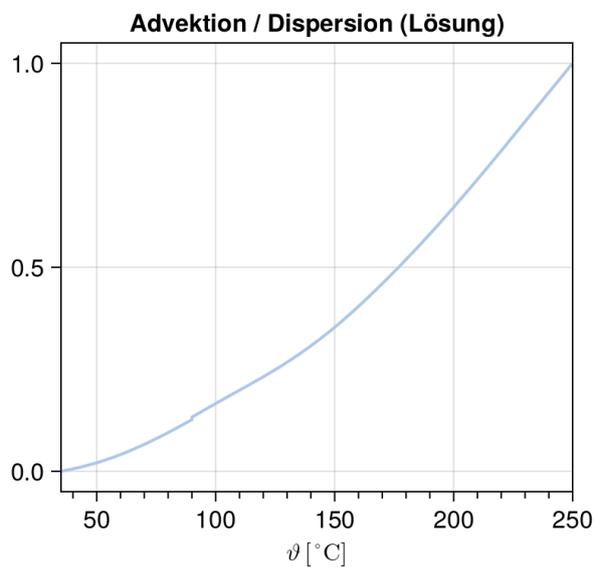
### 5.3.4 Advektion / Dispersion (Lösung)

Zur Ableitung der TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ werden entsprechend dem Advektionsterm in der Transportgleichung die primären TUF „Dichte“ (Gleichung (25)) und „Lösungsdruck“ (Gleichung (13)) mit der aus der Bilanzierungsgröße „Porosität“ nach Gleichung (28) abgeleiteten „Permeabilität“ multipliziert und durch die primäre TUF „Viskosität“ (Gleichungen (22) und (23)) dividiert. Aus den unterschiedlichen

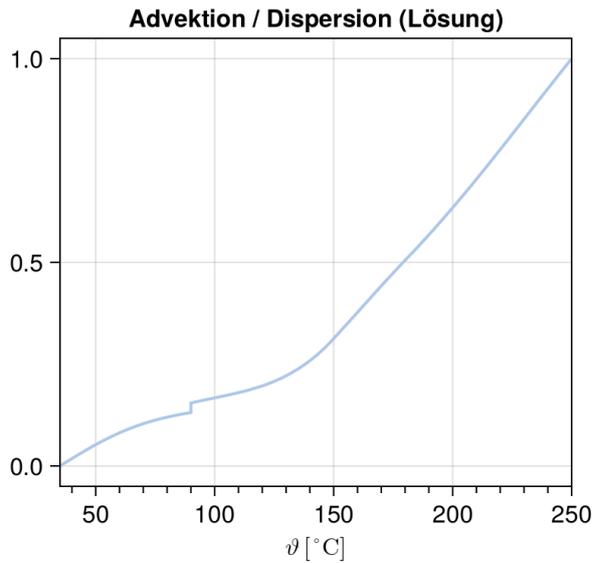
Porositätsbilanzen für die Komponenten Versatz (ohne Pyrit Abb. 5.11, mit Pyrit Abb. 5.12), ALZ (Abb. 5.13) und ewG (Abb. 5.14) ergeben sich auch entsprechend andere abgeleitete TUF in Abb. 5.35 – Abb. 5.38.



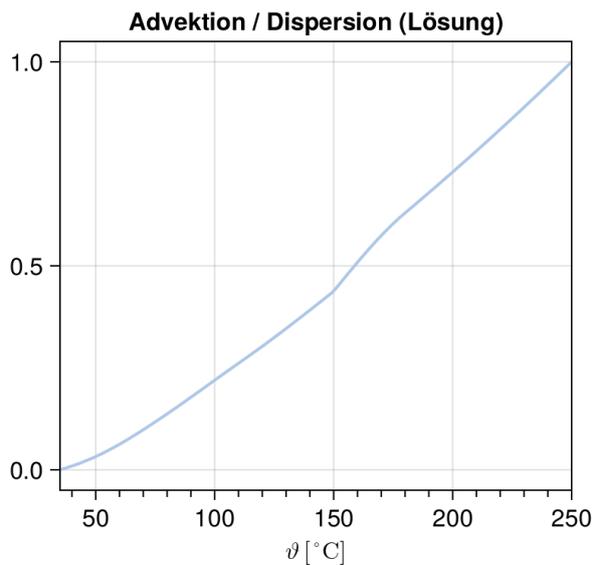
**Abb. 5.35** Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ im Versatz (ohne Pyrit)



**Abb. 5.36** Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ im Versatz (mit Pyrit)



**Abb. 5.37** Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ in der ALZ

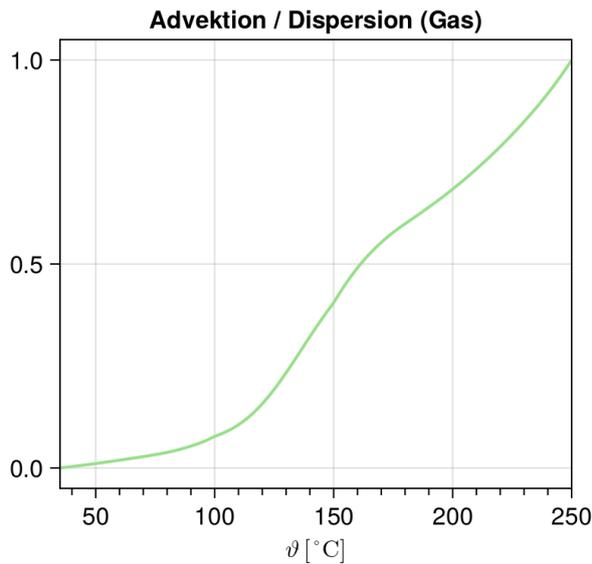


**Abb. 5.38** Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ im ewG

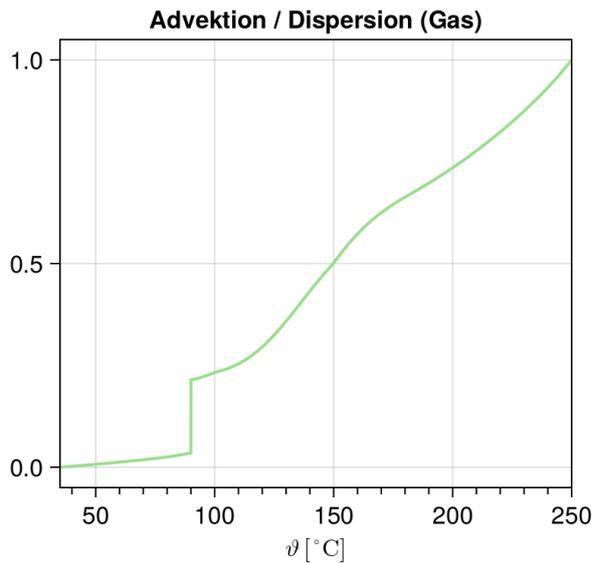
### 5.3.5 Advektion / Dispersion (Gas)

Zur Ableitung der TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ wird entsprechend dem Advektionsterm in der Transportgleichung die Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ mit der primären TUF „Gasdruck“ (Gleichung (14)), der Gasdichte (nach der idealen Gasgleichung dargestellt durch das Produkt aus „Gasmenge“ und Temperatur) sowie der aus der Bilanzierungsgröße „Porosität“ nach Gleichung (28) abgeleiteten „Permeabilität“ multipliziert und

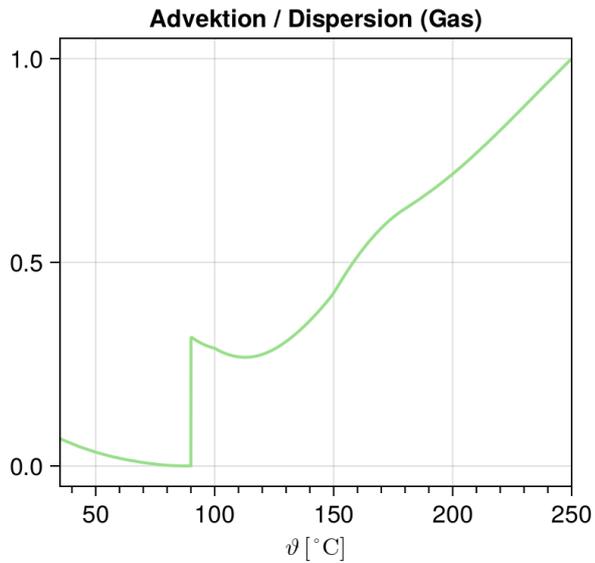
durch die primäre TUF „Viskosität“ (Gleichung (24)) dividiert. Aus den unterschiedlichen Porositätsbilanzen für die Komponenten Versatz (ohne Pyrit Abb. 5.11, mit Pyrit Abb. 5.12) und ALZ (Abb. 5.13) ergeben sich auch entsprechend andere abgeleitete TUF. Aus Abb. 5.39, Abb. 5.40 und Abb. 5.41 wird deutlich, dass die Sensitivität des Ergebnisses in Bezug auf die Porositätsbilanz sehr stark ausgeprägt ist.



**Abb. 5.39** Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ im Versatz (ohne Pyrit)



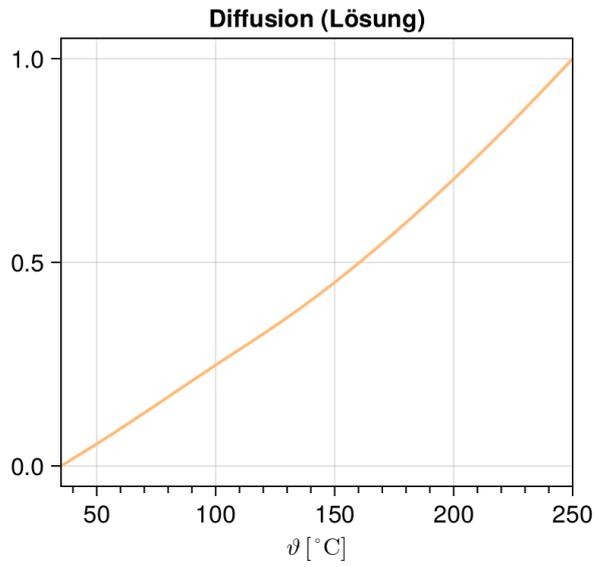
**Abb. 5.40** Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ im Versatz (mit Pyrit)



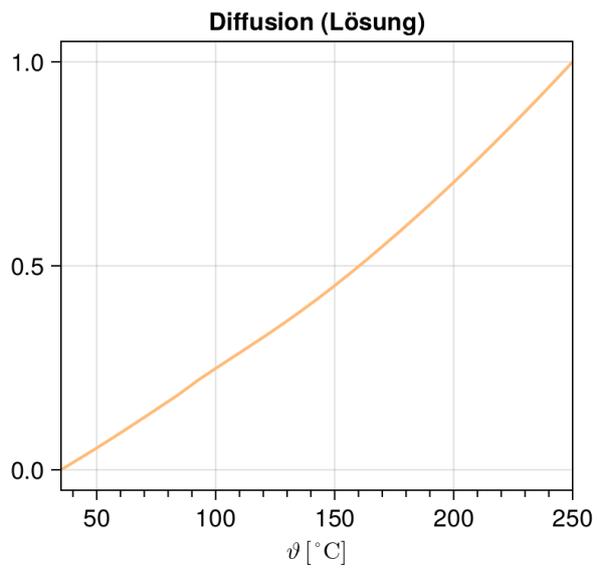
**Abb. 5.41** Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ in der ALZ

### 5.3.6 Diffusion (Lösung)

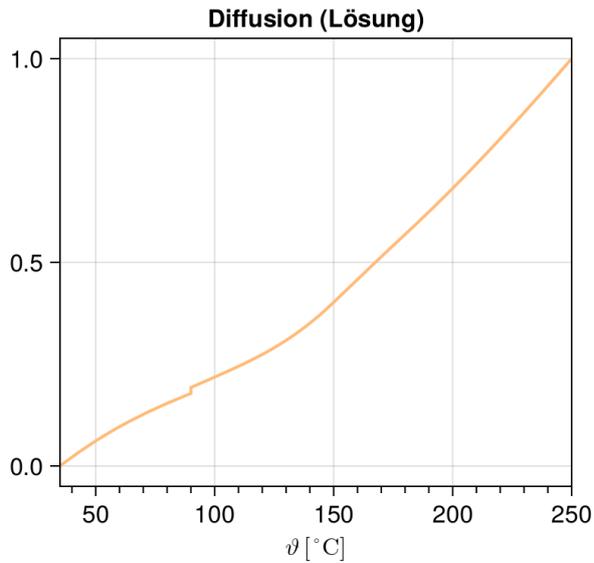
Die abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ ergibt sich aus dem Diffusionsterm der Transportgleichung als Produkt aus der Bilanzierungsgröße „Porosität“ und der primären TUF „Diffusionskoeffizient“ (Gleichung (26)). Aus den unterschiedlichen Porositätsbilanzen für die Komponenten Versatz (ohne Pyrit Abb. 5.11, mit Pyrit Abb. 5.12), ALZ (Abb. 5.13) und ewG (Abb. 5.14) ergeben sich auch entsprechend andere abgeleitete TUF in Abb. 5.42 - Abb. 5.45.



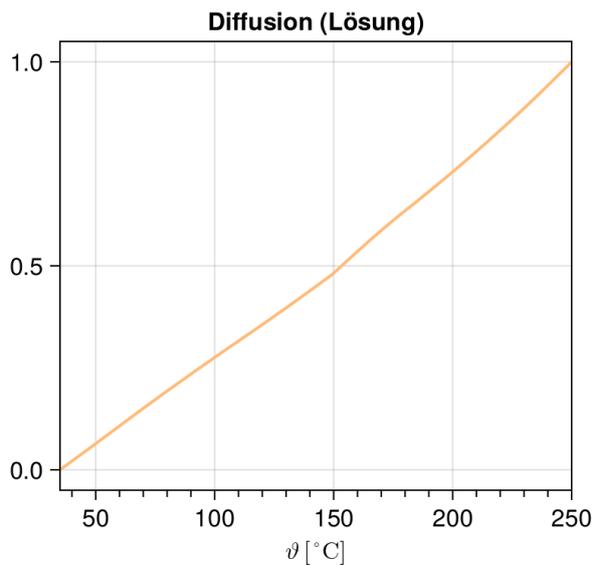
**Abb. 5.42** Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ im Versatz (ohne Pyrit)



**Abb. 5.43** Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ im Versatz (mit Pyrit)



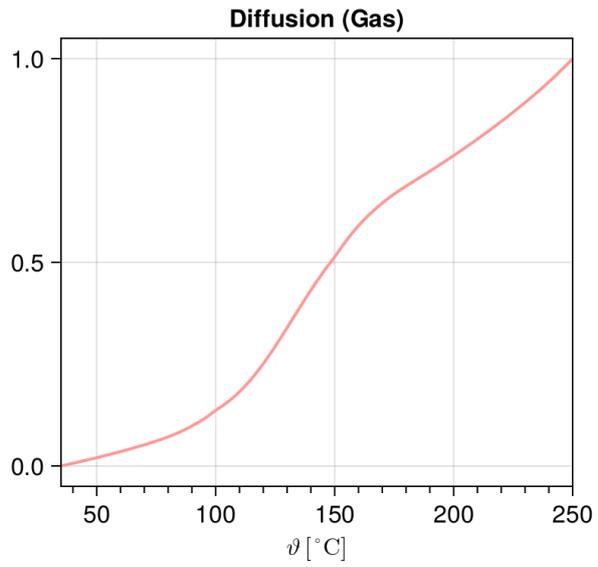
**Abb. 5.44** Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ in der ALZ



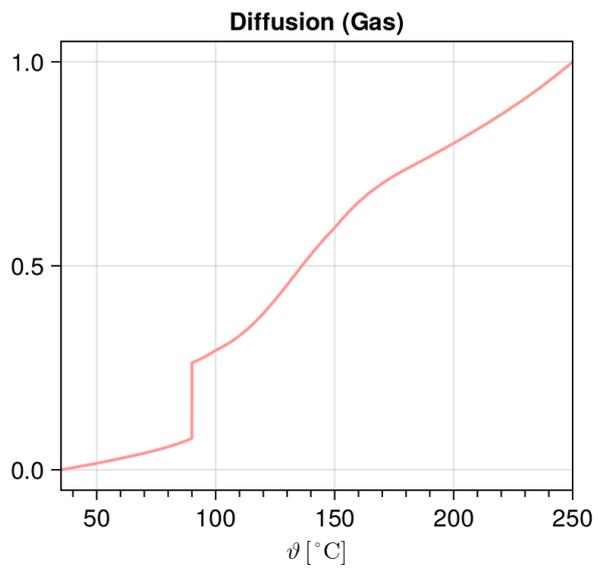
**Abb. 5.45** Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ im ewG

### 5.3.7 Diffusion (Gas)

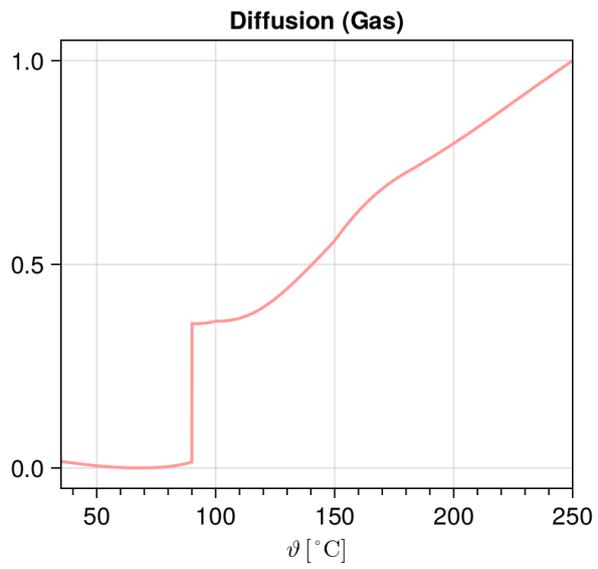
Die abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ ergibt sich aus dem Diffusionsterm der Transportgleichung als Produkt aus den Bilanzierungsgrößen „Porosität“ und „Gasmenge“ sowie der primären TUF „Diffusionskoeffizient“ (Gleichung (27)). Aus Abb. 5.46 (Versatz ohne Pyrit), Abb. 5.47 (Versatz mit Pyrit) und Abb. 5.48 (ALZ) wird deutlich, dass die Sensitivität des Ergebnisses in Bezug auf die Porositätsbilanz sehr stark ausgeprägt ist.



**Abb. 5.46** Abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ im Versatz (ohne Pyrit)



**Abb. 5.47** Abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ im Versatz (mit Pyrit)



**Abb. 5.48** Abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ in der ALZ

## **6 Ableitung der GTUF**

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

### **6.1 Wichtung**

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

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

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

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

- (2) Zum anderen wurden einige primäre bzw. abgeleitete TUF im vorliegenden Ansatz teilweise oder vollständig basierend auf der Expertenmeinung wie oben bei der Bewertung der primären TUF zusammengefasst (Tab. 5.2) hergeleitet. Folgendes Beispiel kann die dabei möglichen Fallstricke verdeutlichen. Für thermochemische Sulfatreduktion ist bekannt, dass sie bei Temperaturen oberhalb von 120 °C stattfindet /CAI 22/ (siehe Kap. 5.1.12). Die ausschließliche Verwendung einer Expertenmeinung könnte zur Folge haben, dass die funktionelle Beschreibung der primären TUF „Thermochemische Sulfatreduktion“ durch einen mehr oder weniger scharfen Anstieg ab 120 °C gekennzeichnet wäre. Die Verwendung von gemessenen und anhand des Arrhenius-Gesetzes extrapolierten Werten der Raten dieser Reaktion /TRU 14/ im vorliegenden Ansatz resultiert allerdings in einem kaum wahrnehmbaren Anstieg der TUF ab 120 °C, der erst ab ca. 180 °C einen steilen Charakter zeigt. Daher sollte aus unserer Sicht eine systematische Ableitung der Wichtungen eine Überbewertung oder ggf. Höherwertung der zu einem erheblichen Maße durch Expertenmeinungen hergeleiteten TUF verhindern können.

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

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

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

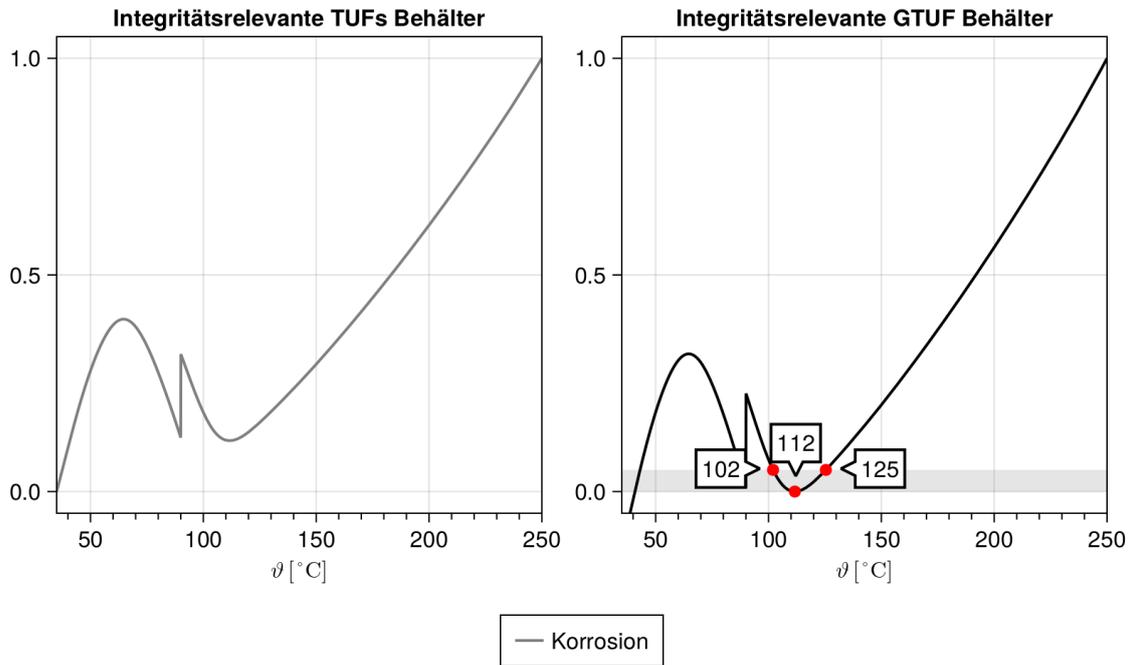
## **6.2 Ableitung der GTUF für einzelne Komponenten**

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

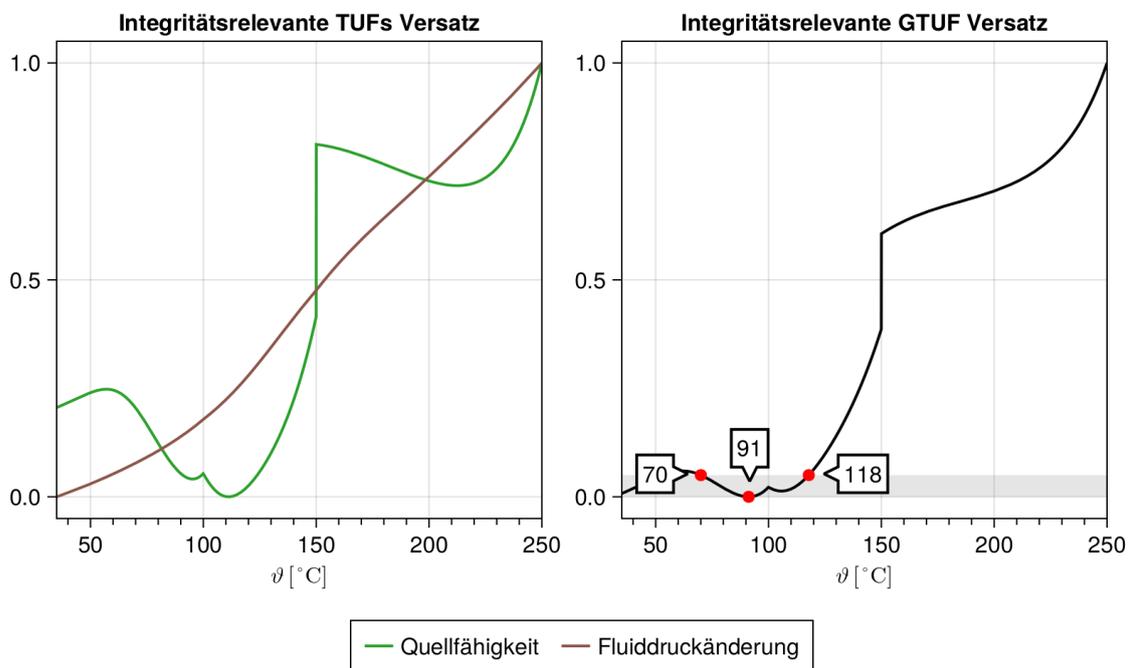
Korrosion), verwendet wurde. Für den Prozess der Versprödung konnte mangels mathematischer Beschreibung seiner Temperaturabhängigkeit keine abgeleitete TUF aufgestellt werden. Sollte die Temperaturabhängigkeit der lokalen Korrosionsprozesse (z. B. Lochfraß) anders als bei der Priorisierung angenommen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

Für jede Komponente werden im Folgenden die integritätsrelevanten abgeleiteten TUF sowie die resultierende GTUF in zwei Varianten aufgeführt. In **Variante 1** (Abb. 6.1 – Abb. 6.4) wurden die abgeleiteten TUF „Korrosion“ und „Quellfähigkeit“ als eine einfache (Gewichte gleich 1) Summe der beitragenden primären TUF aufgestellt. Des Weiteren wurde in dieser Variante ein vernachlässigbarer Pyrit-Gehalt im Versatz vorausgesetzt, was im Fall von einem Bentonitversatz durchaus realisierbar ist /UFE 08/, /KAU 12/. Dadurch werden die TUF „Quellfähigkeit“ und „Fluiddruckänderung“ beeinflusst. In **Variante 2** (Abb. 6.5 - Abb. 6.8) wurden die abgeleiteten TUF „Korrosion“ und „Quellfähigkeit“ als eine gewichtete Summe der beitragenden primären TUF aufgestellt, in der Gewichte entsprechend den Beiträgen dieser primären TUF zu Bilanzierungsgrößen „Gasmenge“ und „H<sub>2</sub>S-Menge“ bzw. aus den zu diesen in Relation stehenden Beiträgen quantifiziert wurden. Für den Versatz wurde in dieser Variante ein maximaler Pyrit-Gehalt entsprechend der Bilanzierung in Kap. 5.2 angenommen, wodurch sich ein Einfluss auf die TUF „Quellfähigkeit“ und „Fluiddruckänderung“ ergibt.

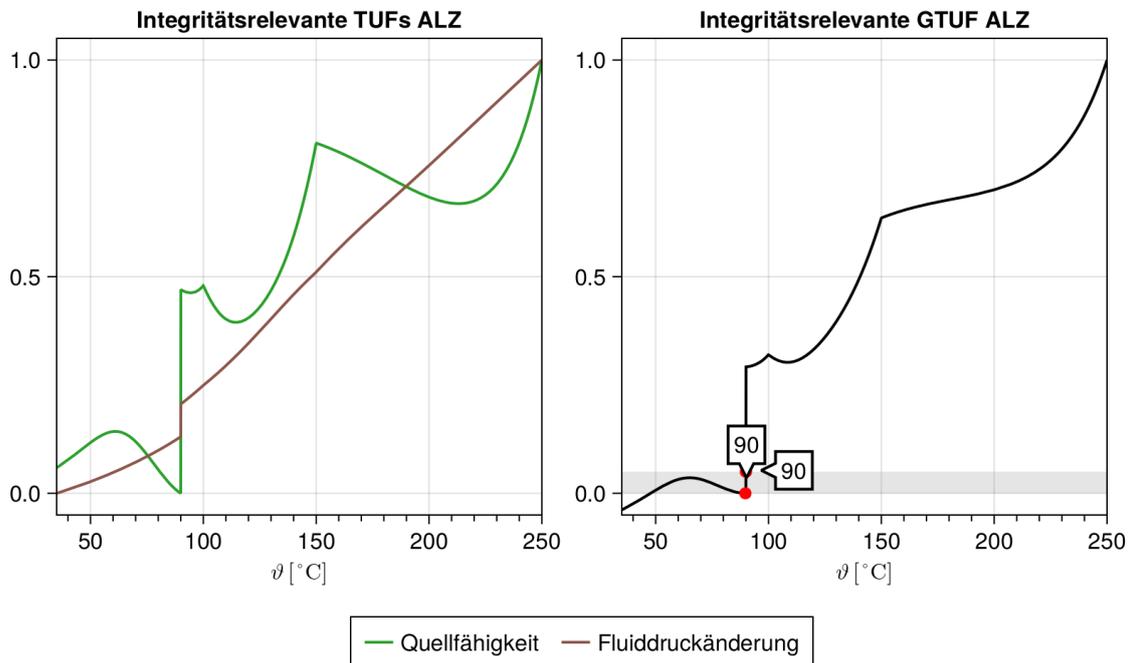
Ferner sind im Folgenden für jede Tonkomponenten die RN-Transportrelevanten abgeleiteten TUF sowie die resultierende GTUF aufgeführt, die eine Hilfestellung bei der Bestimmung eines günstigen Temperaturbereiches leisten können (Abb. 6.9 – Abb. 6.12).



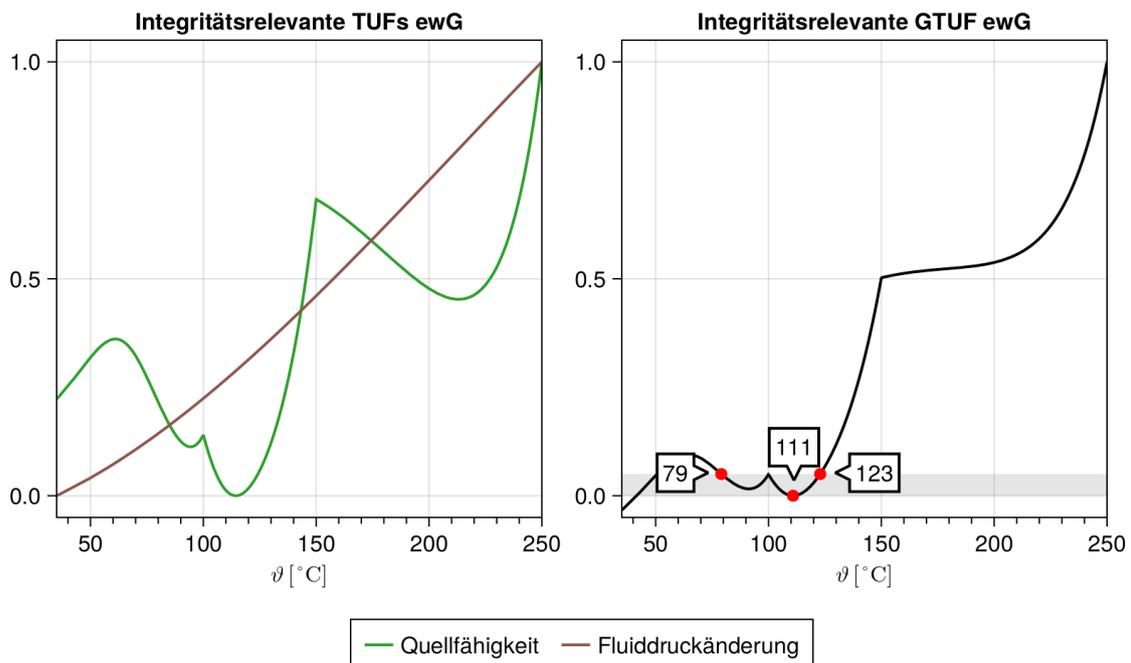
**Abb. 6.1** Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Behälter (rechts) Variante 1



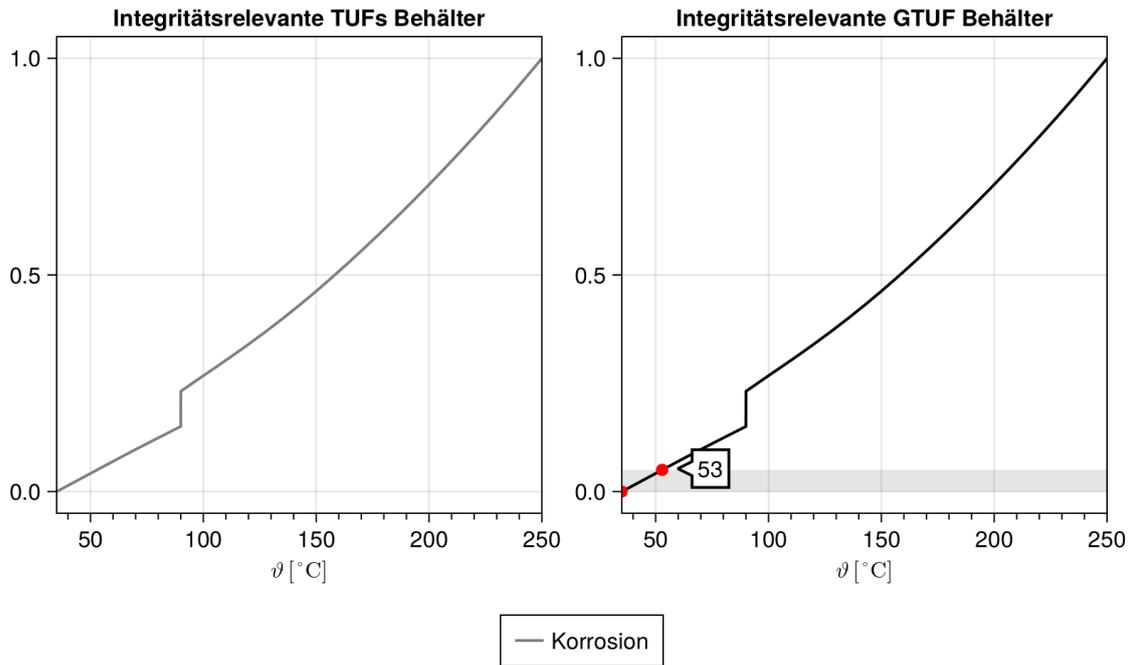
**Abb. 6.2** Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Versatz (rechts) Variante 1



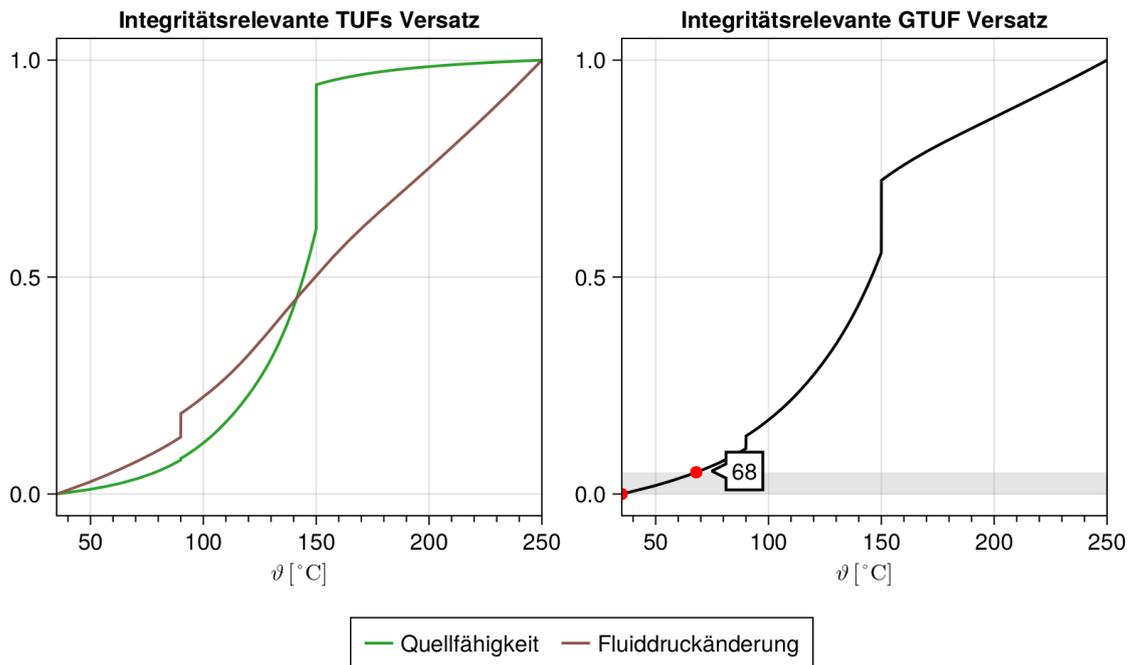
**Abb. 6.3** Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für die ALZ (rechts) Variante 1



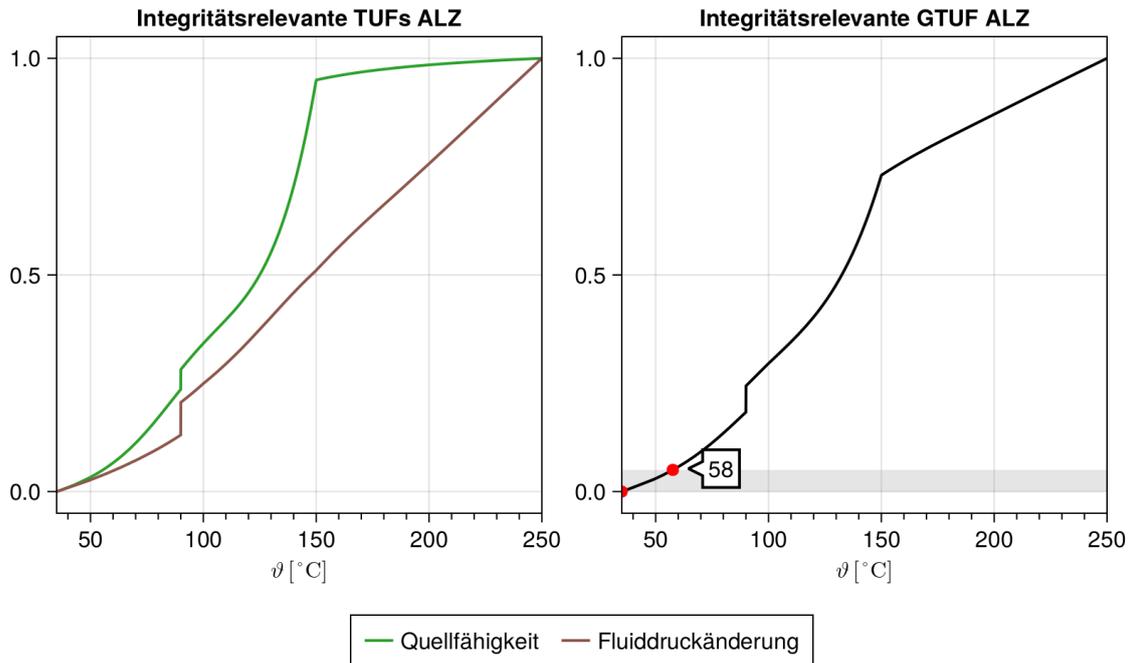
**Abb. 6.4** Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den ewG (rechts) Variante 1



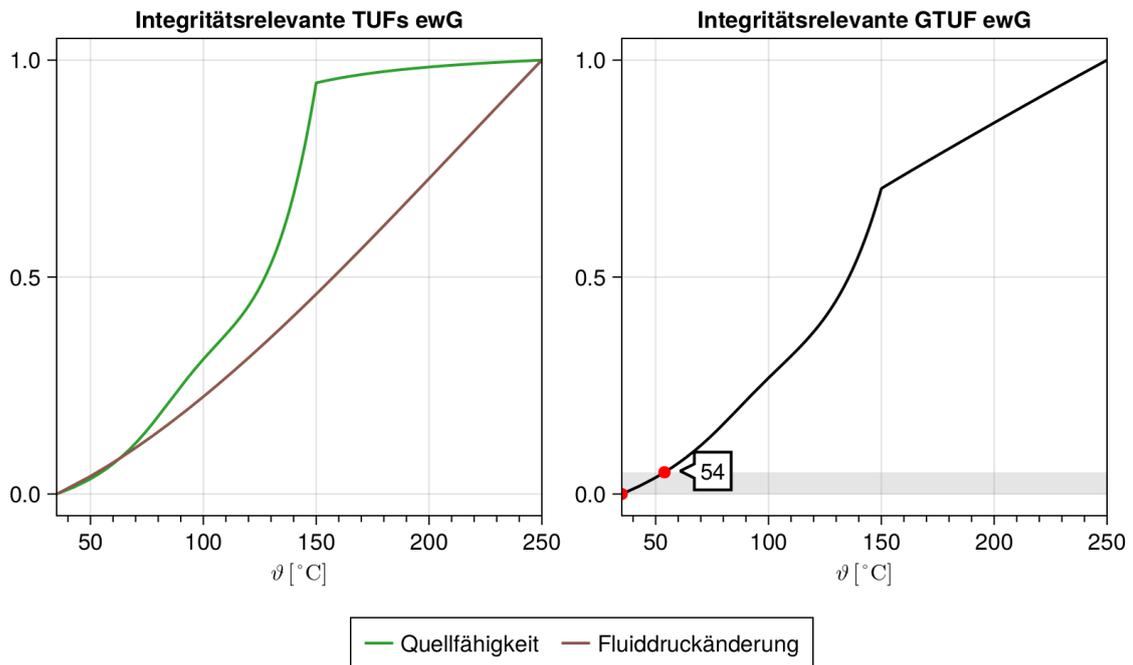
**Abb. 6.5** Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Behälter (rechts) Variante 2



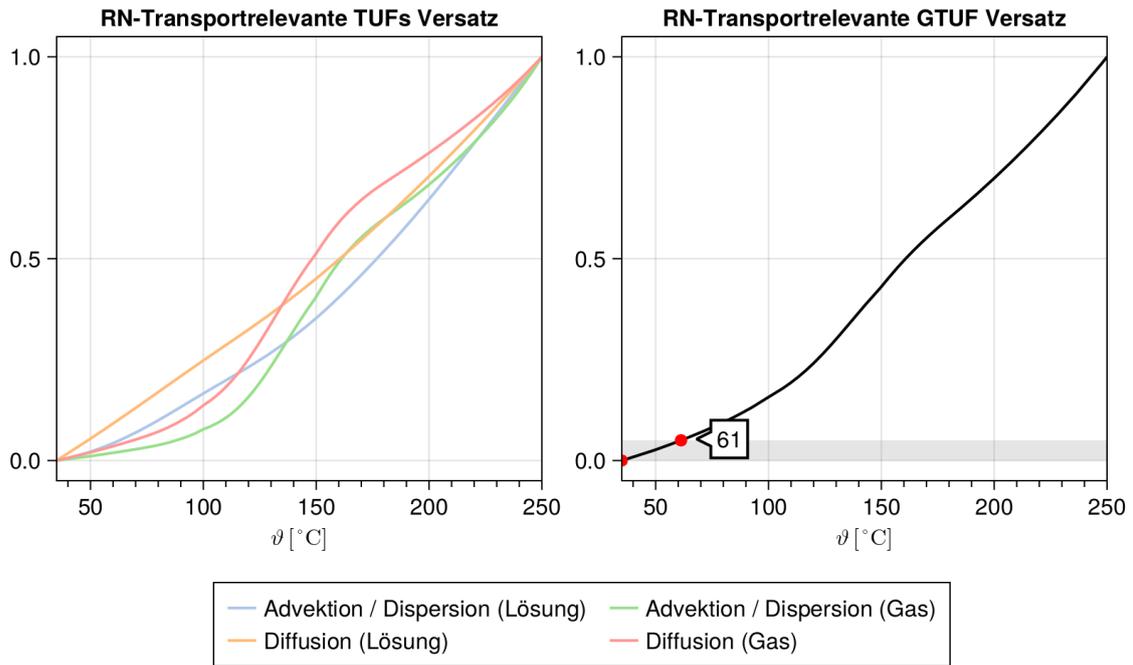
**Abb. 6.6** Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Versatz (rechts) Variante 2



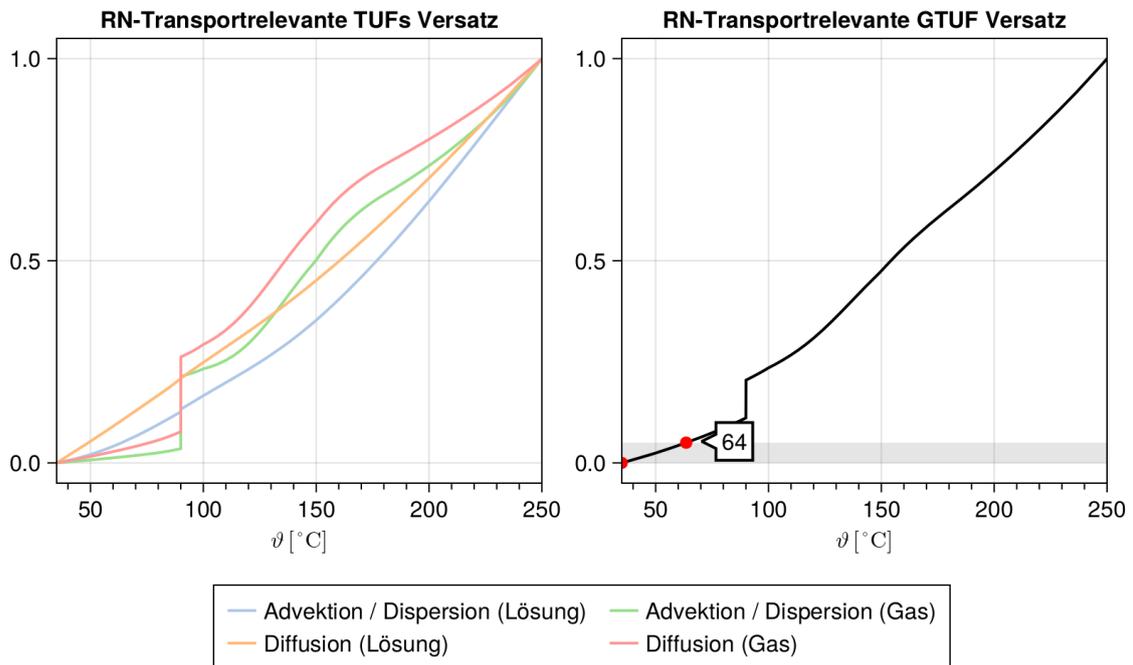
**Abb. 6.7** Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für die ALZ (rechts) Variante 2



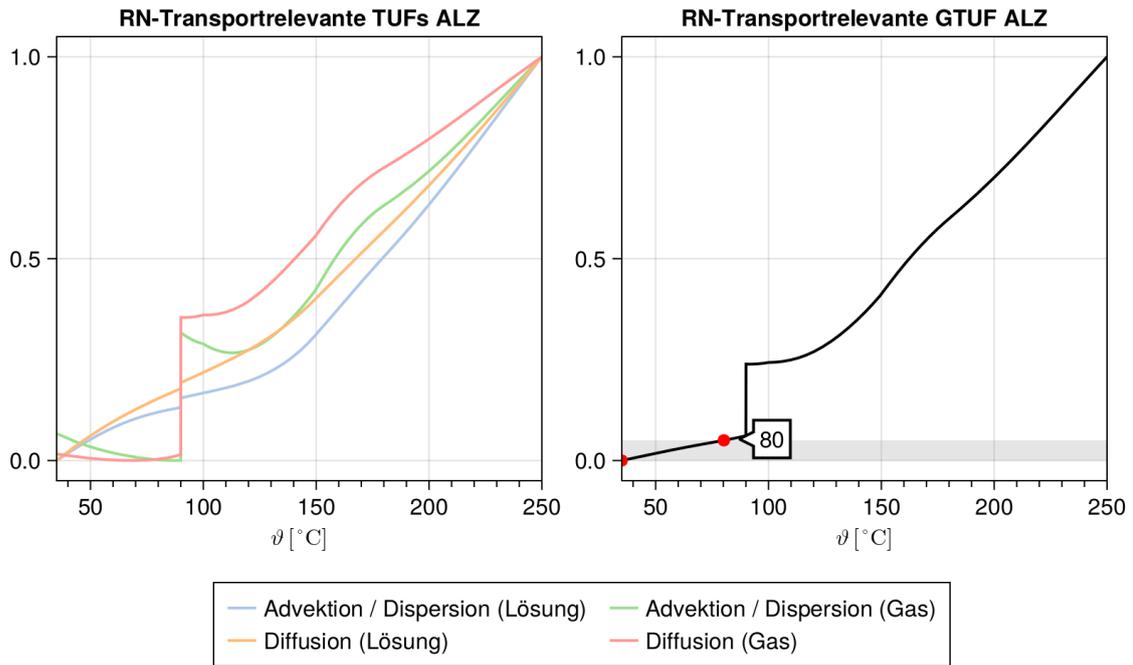
**Abb. 6.8** Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den ewG (rechts) Variante 2



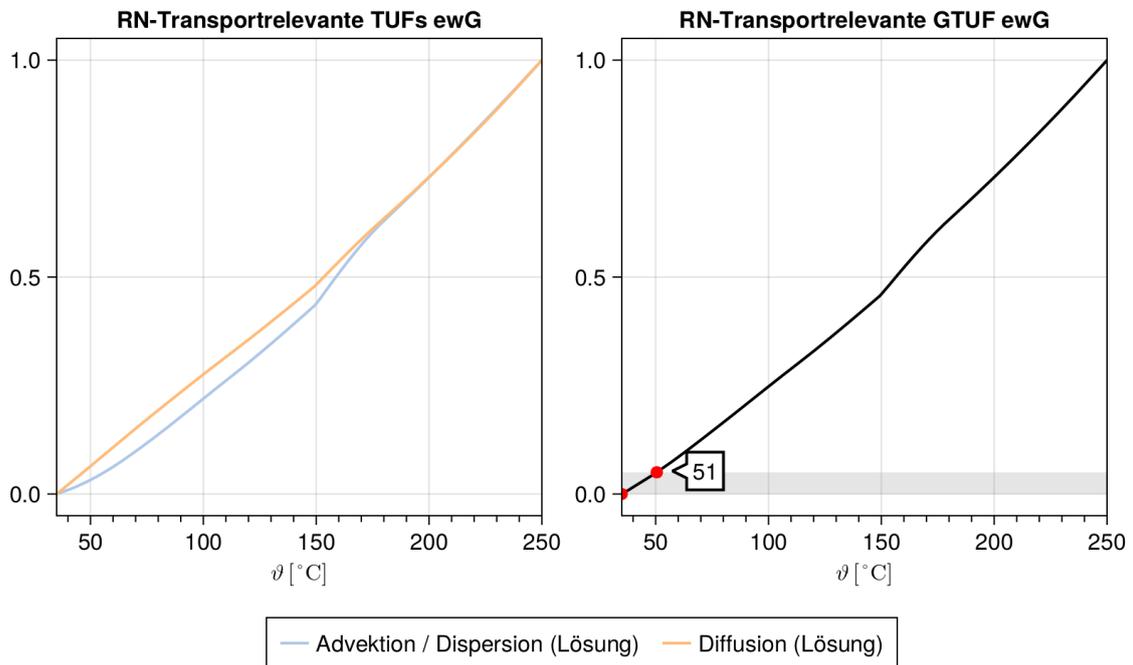
**Abb. 6.9** Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für den Versatz (rechts) Variante 1



**Abb. 6.10** Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für den Versatz (rechts) Variante 2



**Abb. 6.11** Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für die ALZ (rechts)



**Abb. 6.12** Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für den ewG (rechts)

## **7           Ableitung des günstigen Temperaturbereichs für das Gesamtsystem**

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

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

## 7.1 Temperaturverträglichkeit mit den beschriebenen Prämissen

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

**Tab. 7.1** Günstige Temperaturbereiche für die Integrität der Komponenten im Wirtsgestein Tongestein (Variante 1<sup>\*\*\*</sup>)

Komponente	Günstiger Temperaturbereich		
	Untere Grenze*	Minimum GTUF	Obere Grenze*
Behälter	100	112	125
Versatz	70	91	120
Ausbau <sup>**</sup>	--	–	–
ALZ	35	90	90
Wirtsgestein (ewG)	80	111	125

\* die Werte werden gerundet

\*\*der Ausbau hat keine Funktion für die Integrität in der Nachbetriebsphase

\*\*\*s. Unterkapitel 5.3.1, 5.3.2 und 6.2. Wesentliches Unterscheidungsmerkmal der Variante 1 ist die Gleichgewichtung der Beiträge der beteiligten Prozesse. Weitere Merkmale sind (i) positiver Einfluss der Karbonatersetzung auf die Quellfähigkeit der Tone und (ii) vernachlässigbarer Pyrit-Gehalt im Versatz.

**Tab. 7.2** Günstige Temperaturbereiche für die Integrität der Komponenten im Wirtsgestein Tongestein (Variante 2<sup>\*\*\*</sup>)

Komponente	Günstiger Temperaturbereich		
	Untere Grenze*	Minimum GTUF	Obere Grenze*
Behälter	35	35	55
Versatz	35	35	70
Ausbau <sup>**</sup>	--	–	–
ALZ	35	35	60
Wirtsgestein (ewG)	35	35	55

\* die Werte werden gerundet

\*\*der Ausbau hat keine Funktion für die Integrität in der Nachbetriebsphase

\*\*\*s. Unterkapitel 5.3.1, 5.3.2 und 6.2. Wesentliches Unterscheidungsmerkmal der Variante 2 ist die Gewichtung der Beiträge der beteiligten Prozesse entsprechend ihrer Bilanzierung. Weitere Merkmale sind (i) vernachlässigbarer Einfluss der Karbonatersetzung auf die Quellfähigkeit der Tone und (ii) die Verfügbare des Pyrits im Versatz.

Die Übersicht zeigt, dass für die **Variante 1** im Tongestein nur bei der Temperatur von 100 – 120 °C für alle Komponenten mit Ausnahme der ALZ eine günstige Temperatur vorliegt, d.h. diese Temperatur ist prinzipiell als günstig einzuordnen. Unter Berücksichtigung der vorteilhaften Entwicklung der TUF zur mikrobiellen Korrosion und zur Korrosion durch H<sub>2</sub>S wird als günstige Temperatur 120 °C gewählt. Die schnelle Abnahme der Temperatur mit zunehmendem Abstand von der Behälteroberfläche<sup>8</sup> wird bei der Wahl der oberen Grenze qualitativ (mangels Wärmetransportberechnungen) berücksichtigt. Die Integritätsrelevanz der ALZ wird als untergeordnet erachtet. Ein Heranziehen der günstigen Temperaturbereiche hinsichtlich des Transports von Radionukliden zur weiteren Eingrenzung ist nicht erforderlich.

Für die **Variante 2** wird die Erkenntnis gewonnen, dass für Tongestein eine von der Gebirgstemperatur möglichst gering abweichende Temperatur die höchste Temperaturverträglichkeit gewährleistet. Eine größere Abweichung von der Gebirgstemperatur würde demnach eine größere Abweichung von der höchsten Temperaturverträglichkeit mit sich bringen.

Generell ist eine der Voraussetzungen des Optimierungsverfahrens mithilfe von TUF das Vorhandensein eines lokalen Minimums innerhalb des betrachteten Temperaturintervalls (und nicht am Rand). Wenn ein solches Minimum gefunden wird, kann ein günstiger Temperaturbereich um das Minimum (z.B. mithilfe des in diesem Bericht dargestellten 5%-Kriteriums) angegeben werden, um der Größe des Anstieges in der Nähe des Minimums Rechnung zu tragen<sup>9</sup>. Liegt das Minimum jedoch (wie in Variante 2) am linken Rand des betrachteten Temperaturintervalls und verlaufen die GTUF monoton steigend, so kann aus diesem Verfahren keine günstige Temperatur abgeleitet werden. Vielmehr ist in diesem Fall eine (obere) Grenztemperatur zu ermitteln, die sich aus der niedrigsten Temperatur ergibt, bei der ein unbedingt zu vermeidender Prozess abläuft. Die Festlegung eines solchen Prozesses und dessen niedrigster ungünstiger Temperatur muss dann auch unter Berücksichtigung anderer Aspekte (bspw. Flächenbedarf und Teufe des Einlagerungsbereichs) erfolgen, basiert also nicht allein auf Temperaturverträglichkeit und geht daher über den Rahmen dieser Arbeit hinaus.

---

<sup>8</sup> Die Temperatur an der Außengrenze eines Bentonitversatzes liegt in einem Abstand von 30 cm von der Behälteroberfläche 30 °C unterhalb der maximalen Behältertemperatur /HÖK 05/.

<sup>9</sup> Ein steiler Anstieg in der Umgebung des Minimums führt zu einem schmalen günstigen Temperaturbereich. Ein flacher Verlauf der TUF in der Nähe des Minimums ergibt einen breiten günstigen Temperaturbereich.

## 7.2 **Ausblick und weitere Arbeiten**

Der Vergleich der Ergebnisse für diese zwei Varianten stellt insbesondere die Bedeutung der Quantifizierung der Beiträge der mikrobiellen Prozesse heraus, die in der zweiten Variante anhand der Ergebnisse der Studie /PEK 19/ vorgenommen wurde. Eine unabhängige Bestätigung der Ergebnisse dieser Studie wäre für die Festlegung eines nach diesem Ansatz abzuleitenden günstigen Temperaturbereiches entscheidend, weil je nach Größe der Beiträge der mikrobiellen Prozesse das Minimum der günstigen Temperaturen entweder bei Temperaturen kleiner 100 °C oder oberhalb von 100 °C liegt. Um hier Klarheit zu schaffen, könnten bilanzierende Modellierungen anstelle der hier vorgenommenen Bilanzierungsschätzungen die Aussagequalität des Ansatzes verbessern. Zudem sollte untersucht werden, welche Auswirkungen Unterschiede in der verwendeten Grenztemperatur in dem angegebenen Bereich für die Ermittlung von Standortregionen durch die rvSU haben.

Die Quantifizierung der Beiträge der beteiligten Prozesse zur Temperaturunverträglichkeit mittels einer Bilanzierung, wie sie in der Variante 2 implementiert wurde, stellt die konsequente Umsetzung des in diesem Bericht entwickelten Ansatzes dar. Allerdings, wie vorangehend thematisiert, setzt ihre Verwendung eine Bilanzierung entsprechend den jeweils herrschenden Standortverhältnissen voraus. Es ist gegenwärtig im Allgemeinen zu prüfen, inwieweit die für die Bilanzierung verwendeten Ergebnisse verschiedener Studien, darunter auch die Studie /PEK 19/, grundsätzlich auf die deutschen Verhältnisse übertragbar sind.

## 8 Literatur

- /ALC 17/ Alcolea, A., Kuhlmann, U., Marschall, P., Lisjak, A., Grasselli, G., Mahabadi, O., de la Vaissière, R., Leung, H., Shao, H.: A pragmatic approach to abstract the excavation damaged zone around tunnels of a geological radioactive waste repository: application to the HG-A experiment in Mont Terri. Geological Society, London, Special Publications, 443(1), 127-147, 2017.
- /ALF 20a/ Alfarra, A., Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Eickemeier, R., Flügge, J., Frenzel, B., Maßmann, J., Mayer, K.-M., Mönig, J., Mrugalla, S., Müller-Hoeppe, N., Reinhold, K., Rübél, A., Schubarth-Engelschall, N., Simo, E., Thiedau, J., Thiemeyer, T., Weber, J. R., Wolf, J.: RESUS – Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in einer Tongesteinsformation größerer Mächtigkeit. GRS-571, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2020.
- /ALF 20b/ Alfarra, A., Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Eickemeier, R., Flügge, J., Frenzel, B., Maßmann, J., Mayer, K.-M., Mönig, J., Mrugalla, S., Müller-Hoeppe, N., Reinhold, K., Rübél, A., Schubarth-Engelschall, N., Simo, E., Thiedau, J., Thiemeyer, T., Weber, J. R., Wolf, J.: RESUS – Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in einer Tongesteinsformation geringerer Mächtigkeit. GRS-572, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2020.
- /AME 01/ Amend, J. P., Shock, E. L.: Energetics of overall metabolic reactions of thermophilic and hyperthermophilic Archaea and Bacteria, FEMS Microbiology Reviews, 25, 175-243, 2001. DOI: /10.1111/j.1574-6976.2001.tb00576.x.
- /ASH 16/ Ashraf, W.: Carbonation of cement-based materials: Challenges and opportunities, Construction and Building Materials, 120, 558-570, 2016.
- /AVS 05/ Avsar, E., Ulusay, R., Erguler, Z. A. : Swelling properties of Ankara (Turkey) clay with carbonate concretions. Environmental & Engineering Geoscience, 11(1), 73-93, 2005.

- /BER 21/ Bertrams, N., Herold, P., Leonhard, J., Marggraf, U., Seidel, D., Wunderlich, A.: TREND - Weiterentwicklung der Konzepte der Transport- und Einlagerungstechnik von Endlagerbehältern, BGE TEC 2021-01, Peine, 2021.
- /BGE 22/ Bundesgesellschaft für Endlagerung: Methodenbeschreibung zur Durchführung der repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen gemäß Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung, Peine, 2022.
- /BRA 19/ Bracke, G., Hartwig-Thurat, E., Larue, J., Meleshyn, A., Weyand, T.: Untersuchungen zu den „maximalen physikalisch möglichen Temperaturen“ gemäß § 27 StandAG im Hinblick auf die Grenztemperatur an der Außenfläche von Abfallbehältern. Bericht GRS-A-3948. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, 2019.
- /BRU 12/ Bruggeman, C., Craen, M. de: Boom Clay natural organic matter. Studiecetrum voor Kernenergie Centre D'Etude De L'Energie Nucleaire (SCK-CEN): Mol, Juni 2012.
- /BUN 20/ Deutscher Bundestag: Verordnung des Bundesministeriums für Umwelt, Natur-schutz und nukleare Sicherheit: Verordnung über Sicherheitsanforderungen und vor-läufige Sicherheitsuntersuchungen für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle, Deutscher Bundestag, Drucksache 19/19291 vom 18.05.2020.
- /BUS 16/ Busch, A., Bertier, P., Gensterblum, Y., Rother, G., Spiers, C. J., Zhang, M., Wentinck, H. M.: On sorption and swelling of CO<sub>2</sub> in clays. Geomechanics and Geophysics for Geo-Energy and Geo-Resources, Bd. 2, Nr. 2, S. 111–130, 2016. DOI: 10.1007/s40948-016-0024-4
- /CAI 22/ Cai, C., Li, H., Li, K., Wang, D.: Thermochemical sulfate reduction in sedimentary basins and beyond: A review. Chemical Geology, 121018, 2022.
- /CHA 70/ Chapman, S., Cowling, T.G.: The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases (3rd ed.), Cambridge University Press, 1970.

- /CHE 13/ Chen, C., Park, D. W., Ahn, W. S.: Surface modification of a low cost bentonite for post-combustion CO<sub>2</sub> capture. *Applied Surface Science*, 283, 699-704, 2013.
- /COU 85/ Couture, R. A.: Steam rapidly reduces the swelling capacity of bentonite. *Nature*, Bd. 318, S. 50–52, 1985. DOI : 10.1038/318050a0
- /COU 98/ Coudrain-Ribstein, A., Gouze, P., Marsily, G. de: Temperature-carbon dioxide partial pressure trends in confined aquifers. *Chemical Geology*, Bd. 145, 1-2, S. 73–89, 1998. DOI: 10.1016/S0009-2541(97)00161-7
- /CUE 01/ Cuevas, J., Garralón, A., Ramírez, S., Leguey, S.: Hydrothermal alteration of a saponitic bentonite, Mineral reactivity and evolution of surface properties. *Clay Minerals*, Bd. 36, Nr. 01, S. 61–74, 2001. DOI: 10.1180/000985501547358
- /CZA 24a/ Czaikowski, O., Förster, B., Hinze, M., Mayer, K.-M., Meleshyn, A., Middelhoff, M., Rübél, A., Wieczorek, K., Wolf, J.: Ableitung der wirtsgesteinspezifischen Temperaturverträglichkeit von Endlagerkomponente – Wirtsgestein Kristallingestein. Bericht GRS-755. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2024.
- /CZA 24b/ Czaikowski, O., Förster, B., Hinze, M., Mayer, K.-M., Meleshyn, A., Middelhoff, M., Rübél, A., Wieczorek, K., Wolf, J.: Ableitung der wirtsgesteinspezifischen Temperaturverträglichkeit von Endlagerkomponente – Wirtsgestein Steinsalz. Bericht GRS-756. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2024.
- /DIE 88/ Diercks, D. R., Hull, A. B., Kassner, T. F.: Analysis of corrosion data for carbon steels in simulated salt repository brines and acid chloride solutions at high temperatures. in Joint US/FRG Technical Exchange Workshop, Albuquerque, NM, March 8-10, 1988.
- /EIN 05/ Einstein, A.: Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. *Ann. Phys.*, 322: 549-560. <https://doi.org/10.1002/andp.19053220806>, 1905.

- /ELI 08/ Elie, M., Mazurek, M.: Biomarker transformations as constraints for the depositional environment and for maximum temperatures during burial of Opalinus Clay and Posidonia Shale in northern Switzerland. *Applied Geochemistry*, 23(12), 3337-3354, 2008.
- /ESK 22/ Entsorgungskommission: Stellungnahme der Entsorgungskommission zum 100 Grad Celsius Kriterium in § 27 (4) des Standortauswahlgesetzes. Stellungnahme der Entsorgungskommission (ESK) vom 12.05.2022
- /FER 03/ Fernández-Prini, R., Alvarez, J. L., & Harvey, A. H. (2003). Henry's constants and vapor–liquid distribution constants for gaseous solutes in H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O at high temperatures. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 32(2), 903-916.
- /FRE 20/ Freeze, G., Sevougian, S. D., Kuhlman, K., Gross, M., Wolf, J., Buhmann, D., Bartol, J., Leigh, C., Mönig, J.: Generic FEPs Catalogue and Salt Knowledge Archive. SANDIA REPORT SAND2020-13186, 2020.
- /GAN 16/ Ganopolski, A., Winkelmann, R., Schellnhuber, H. J.: Critical insolation – CO<sub>2</sub> relation for diagnosing past and future glacial inception. *Nature*, 529 (7585): 200-203, 2016.
- /GAO 17/ Gao, S., Jin, P., Brown, B., Young, D., Nešić, S., Singer, M.: Effect of high temperature on the aqueous H<sub>2</sub>S corrosion of mild steel. *Corrosion*, 73(10), 1188-1191, 2017.
- /GEN 09/ Gens, A., Sánchez, M., Guimarães, L. Do N., Alonso, E. E., Lloret, A., Olivella, S., Villar, M. V., Huertas, F.: A full-scale in situ heating test for high-level nuclear waste disposal: observations, analysis and interpretation, *Géotechnique* 59, 4, 377–399, 2009.  
DOI: 10.1680/geot.2009.59.4.377
- /GEN 13/ Gens, A.: On the hydromechanical behaviour of argillaceous hard soils–weak rocks. In *Proceedings of the 15<sup>th</sup> European Conference on Soil Mechanics and Geotechnical Engineering–Geotechnics of Hard Soils–Weak Rocks (Part 4)*. Anagnostopoulos, A. (Ed.), IOS Press, 71-118, 2013.

- /GEV 81/ Gevantman, L.H. (Ed.): Physical Properties Data for Rock Salt, NBS Monograph 167, U.S. Department of Commerce / National Bureau of Standards, Washington D.C., January 1981.
- /GIR 18/ Giroud, N., Tomonaga, Y., Wersin, P., Briggs, S., King, F., Vogt, T., Diomidis, N.: On the fate of oxygen in a spent fuel emplacement drift in Opalinus Clay, Applied Geochemistry, Volume 97, 270-278, 2018. DOI: 10.1016/j.apgeochem.2018.08.011.
- /GOM 21/ Gómez Romera, J.J.: jgomera/iapws: (v1.5.2). Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.4744318>, 2021.
- /GOU 16/ Goult, N. R., Sargent, C., Andras, P., Aplin, A. C.: Compaction of diagenetically altered mudstones—Part 1: Mechanical and chemical contributions. Marine and Petroleum Geology, 77, 703-713, 2016.
- /HER 20/ Herold, P., Gruner, M, Jobmann, M, Kudla, W, Müller, C.: Teilbericht zum Arbeitspaket 1 - Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse im Ton- und Salzgestein. ELSA Phase 2. BGE TEC 2020-11. BGE TECHNOLOGY GmbH, Technische Universität Bergakademie Freiberg - Institut für Bergbau und Spezialtiefbau. Peine, 2020.
- /HEU 14/ Heuser, M., Weber, C., Stanjek, H., Chen, H., Jordan, G., Schmahl, W. W., Natzeck, C.: The interaction between bentonite and water vapor. I, Examination of physical and chemical properties. Clays and Clay Minerals, Bd. 62, Nr. 3, S. 188–202, 2014. DOI 10.1346/CCMN.2014.0620303
- /HÖK 05/ Hökmark, H., Claesson, J.: Use of an analytical solution for calculating temperatures in repository host rock. Engineering geology, 81(3), 353-364, 2005.
- /HUC 21/ Hucheng, D., Meiyan, F., Wen, Z., Liying, Z., Xinhui, X., Yilin, L., Dailun, W.: The pores evolution of lacustrine shale induced by smectite-to-illite conversion and hydrocarbon generation: upper Triassic Yanchang Formation, Ordos Basin, China. Journal of Petroleum Science and Engineering, 202, 108460, 2021.

- /JAH 13/ Jahn S, Sönke J. Endlagerstandortmodell Nord Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis. Projekt ANSICHT: Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein. Hannover: BGR; 2013.
- /JAH 16/ Jahn S, Mrugalla S, Stark L. Endlagerstandortmodell SÜD Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis. Projekt ANSICHT: Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein. Hannover: BGR; 2016.
- /JOB 07/ Jobmann, M., Polster, M.: The response of Opalinus clay due to heating, A combined analysis of in situ measurements, laboratory investigations and numerical calculations. Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C, Bd. 32, 8-14, S. 929–936, 2007. DOI: 10.1016/j.pce.2006.03.014
- /JOB 15/ Jobmann, M., Lommerzheim, A.: Endlagerkonzept sowie Verfüll- und Verschlusskonzept für das Endlagerstandortmodell SÜD. ANSICHT. TEC-26-2015-TB. DBE TECHNOLOGY GmbH. Peine, 2015.
- /JOB 16/ Jobmann, M., Burlaka, V., Meleshyn, A., Rübel. A.: Projekt ANSICHT. Spezifische Prozessanalysen. Arbeitsbericht TEC-13-2016-B, 2016.
- /JOC 81/ Jockwer, N.: Untersuchungen zu Art und Menge des im Steinsalz des Zechsteins enthaltenen Wassers sowie dessen Freisetzung und Migration im Temperaturfeld endgelagerter radioaktiver Abfälle. Disseratation, 134 S., Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, Technische Universität Clausthal: Clausthal, 15. Juni 1981.
- /KAS 03/ Kashefi, K.; Lovley, D. R.: Extending the upper temperature limit for life. Science 301, 934, 2003.
- /KAS 08/ Kashefi, K., Shelobolina, E. S., Elliott, W. C., Lovley, D. R.: Growth of thermophilic and hyperthermophilic Fe (III)-reducing microorganisms on a ferruginous smectite as the sole electron acceptor. Applied and Environmental Microbiology 74, 251–258, 2008.

- /KAU 12/ Kaufhold, S., Hein, M., Dohrmann, R., Ufer, K.: Quantification of the mineralogical composition of clays using FTIR spectroscopy. *Vibrational Spectroscopy*, 59, 29-39, 2012.
- /KAU 13/ Kaufhold, A., Gräsle, W., Plischke, I., Dohrmann, R., Siegesmund, S.: Influence of carbonate content and micro fabrics on the failure strength of the sandy facies of the Opalinus Clay from Mont Terri (Underground Rock Laboratory). *Engineering geology*, 156, 111-118, 2013.
- /KAU 23/ Kaufhold, S., Dohrmann, R., Wallis, I., Weber, C.: Chemical and mineralogical reactions of bentonites in geotechnical barriers at elevated temperatures—review of experimental evidence and modelling progress. *Clay Minerals*, 1-43, 2023.
- /KLI 09/ Klinkenberg, M., Kaufhold, S., Dohrmann, R., Siegesmund, S.: Influence of carbonate microfabrics on the failure strength of claystones. *Engineering Geology*, 107(1-2), 42-54, 2009.
- /KNE 21/ Kneuker, T., Furche, M.: Capturing the structural and compositional variability of Opalinus Clay: constraints from multidisciplinary investigations of Mont Terri drill cores (Switzerland). *Environmental Earth Sciences*, 80(11), 421, 2021.
- /KNE 23/ Kneuker, T., Dohrmann, R., Ufer, K., Jaeggi, D.: Compositional-structural characterization of the Opalinus Clay and Passwang Formation: New insights from Rietveld refinement (Mont Terri URL, Switzerland). *Applied Clay Science*, 242, 107017, 2023.
- /KOM 16/ Abschlussbericht der Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe. Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe Berlin, K-Drs. 268, 5. Juli 2016.
- /KOZ 27/ Kozeny, J.: Über kapillare Leitung des Wassers im Boden (Aufstieg, Versickerung und Anwendung auf die Bewässerung). *Sitzungsber. Akad. Wiss., Wien*, 136(2a): 271-306, 1927.

- /KUH 13/ Kuhlman, K. L., Malama, B.: Brine flow in heated geologic salt (No. SAND2013-1944). Sandia National Lab. (SNL-NM), Albuquerque, NM (United States), 2013.
- /LAG 94/ Lagerblad, B., Trägårdh, J.: Conceptual model for concrete long time degradation in a deep nuclear waste repository, SKB-TR-95-21, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden, 1994.
- /MAR 18/ Marschall, P., Giger, S., De La Vassière, R., Shao, H., Leung, H., Nussbaum, C., Trick, T., Lanyon, B., Senger, R., Lisjak, A., Alcolea, A.: Hydro-mechanical evolution of the EDZ as transport path for radionuclides and gas: insights from the Mont Terri rock laboratory (Switzerland). Mont Terri Rock Laboratory, 20 Years: Two Decades of Research and Experimentation on Claystones for Geological Disposal of Radioactive Waste, 175-196, 2018.
- /MEL 23/ Meleshyn, A., Hinze, M., Middelhoff, M., Jantschik, K.: Thermische Integrität von Ton und Tonsteinen. Experiment und gekoppelte THMC-Simulationen (THMC-Sim), Technical Report in preparation, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2023.
- /MIC 99/ Michel, R., Kirchhoff, K.: Nachweis-, Erkennungs- und Vertrauensgrenzen bei Kernstrahlungsmessungen. TÜV-Verlag, 1999.
- /MON 11/ Monfared, M., Sulem, J., Delage, P., Mohajerani, M.: A laboratory investigation on thermal properties of the Opalinus claystone. Rock Mechanics and Rock Engineering, 44(6), 735-747, 2011.
- /NEA 00/ Nuclear Energy Agency: Features, Events and Processes (FEPs) for Geologic Disposal of Radioactive Waste, An International Database. Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD) NEA, Paris, France, 2000.
- /NEA 19/ Nuclear Energy Agency: International Features, Events and Processes (IFEP) List for the Deep Geological Disposal of Radioactive Waste, Version 3.0, NEA/RWM/R(2019)1, 2019.

- /OH 03/ Oh, E. E., van Ginkel, S., Logan, B. E.: The relative effectiveness of pH control and heat treatment for enhancing biohydrogen gas production. *Environmental Science and Technology* 37, 5186–5190, 2003.
- /OSC 89/ Oscarson, D. W., Dixon, D. A.: The effect of steam on montmorillonite. *Applied Clay Science*, Bd. 4, Nr. 3, S. 279–292, 1998. DOI: 10.1016/0169-1317(89)90035-5
- /OUH 10/ Ouhadi, V. R., Yong, R. N., Goodarzi, A. R., Safari-Zanjani, M.: Effect of temperature on the re-structuring of the microstructure and geo-environmental behaviour of smectite. *Applied Clay Science*, Bd. 47, S. 2–9, DOI 10.1016/j.clay.2008.08.008, 2010.
- /PAR 19/ Parkes, R. J., Berlendis, S., Roussel, E. G., Bahruji, H., Webster, G., Oldroyd, A., Weightman, A.J., Bowker, M., Davies, P.R., Sass, H.: Rock-crushing derived hydrogen directly supports a methanogenic community: significance for the deep biosphere. *Environmental microbiology reports*, 11(2), 165-172, 2019.
- /PED 17/ Pedersen, K., Bengtsson, A., Blom, A., Johansson, L., Taborowski, T.: Mobility and reactivity of sulphide in bentonite clays—implications for engineered bentonite barriers in geological repositories for radioactive wastes. *Applied Clay Science*, 146, 495-502, 2017.
- /PEK 19/ Pekala, M., Wersin, P., Cloet, V., Diomidis, N.: Reactive transport calculations to evaluate sulphide fluxes in the near-field of a SF/HLW repository in the Opalinus Clay. *Applied geochemistry*, 100, 169-180, 2019.
- /PHI 81/ Phillips, S.L., Igbene, A., Fair, J.A., Ozbek, H., Tavana, M.: A technical databook for geothermal energy utilization. Lawrence Berkeley Laboratory University of California Berkeley, LBL-12810, Juni 1981.

- /PUI 01/ Puigdomenech, I., Ambrosi, J. P., Eisenlohr, L., Lartigue, J. E., Banwart, S. A., Bateman, K., Milodowski, A. E., West, J. M., Griffaut, L., Gustafsson, E., Hama, K. Yoshida, H., Kotelnikova, S., Pedersen, K., Michaud, V., Trotignon, L., Rivas Perez, J., Tullborg, E. L.: O<sub>2</sub> depletion in granitic media. The Rex project (No. SKB-TR--01-05). Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co, 2001.
- /QI 14/ Qi, Y., Luo, H., Zheng, S., Chen, C., Lv, Z., Xiong, M.: Effect of temperature on the corrosion behavior of carbon steel in hydrogen sulphide environments. *International Journal of Electrochemical Science*, 9(4), 2101-2112, 2014.
- /ROT 86/ Rothfuchs, T.: Untersuchung der thermisch induzierten Wasserfreisetzung aus polyhalitischem Steinsalz unter in situ Bedingungen, Temperaturversuch 5 im Salzbergwerk Asse. Kommission der Europäischen Gemeinschaften (KEG), Kernforschung und -technologie, EUR 10392 DE, 85 S.: Luxemburg, 1986.
- /RUT 14/ Rutqvist, J., Zheng, L., Chen, F., Liu, H. H., Birkholzer, J.: Modeling of coupled thermo-hydro-mechanical processes with links to geochemistry associated with bentonite-backfilled repository tunnels in clay formations. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 47, 167-186, 2014.
- /SCH 19/ Schlegel, M. L., Martin, F., Fenart, M., Blanc, C., Varlet, J., Foy, E., Prêt, D. Trcera, N.: Corrosion at the carbon steel-clay compact interface at 90° C: Insight into short-and long-term corrosion aspects. *Corrosion Science*, 152, 31-44, 2019.
- /SCH 21/ Schlegel, M. L., Martin, F., Fenart, M., Blanc, C., Varlet, J., Foy, E.: Corrosion of carbon steel in clay compact environments at 90 C: Effect of confined conditions. *Corrosion Science*, 184, 109368, 2021.
- /SEN 08/ Senger, R., Marschall, P., Finsterle, S.: Investigation of two-phase flow phenomena associated with corrosion in an SF/HLW repository in Opalinus Clay, Switzerland. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 33, S317-S326, 2008.

- /STE 19/ Stefanoni, M., Angst, U. M., Elsener, B.: Kinetics of electrochemical dissolution of metals in porous media. *Nature Materials*, 18(9), 942-947, 2019.
- /STO 22/ Stone, J., Edgar, J.O., Gould, J.A., Telling, J.: Tectonically-driven oxidant production in the hot biosphere. *Nat Commun* 13, 4529, 2022. DOI: 10.1038/s41467-022-32129-y
- /ŠUC 93/ Šucha, V.: Smectite to Illite Conversion in Bentonites and Shales of the East Slovak Basin. *Clay Minerals*, Bd. 28, Nr. 2, S. 243–253, DOI 10.1180/claymin.1993.028.2.06, 1993.
- /SUL 02/ Sultan, N., Delage, P., Cui, Y.: Temperature effects on the volume change behaviour of Boom clay. *Engineering Geology*, Bd. 64, S. 135–145, DOI 10.1016/S0013-7952(01)00143-0, 2002.
- /TAK 08/ Takai, K., Nakamura, K., Toki, T., Tsunogai, U., Miyazaki, M., Miyazaki, J., Hirayama, H., Nakagawa, S., Nunoura, T., Horikoshi, K.: Cell proliferation at 122 C and isotopically heavy CH<sub>4</sub> production by a hyperthermophilic methanogen under high-pressure cultivation. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 105(31), 10949-10954, 2008.
- /THY 11/ Thyberg, B., Jahren, J.: Quartz cementation in mudstones, Sheet-like quartz cement from clay mineral reactions during burial. *Petroleum Geoscience*, Bd. 17, Nr. 1, S. 53–63, DOI 10.1144/1354-079310-028, 2011.
- /TRU 13/ Truche, L., Jodin-Caumon, M.-C., Lerouge, C., Berger, G., Mosser-Ruck, R., Giffaut, E., Michau, N. (2013). Sulphide mineral reactions in clay-rich rock induced by high hydrogen pressure. Application to disturbed or natural settings up to 250°C and 30 bar H<sub>2</sub>, *Chemical Geology*, 2013. DOI: 10.1016/j.chemgeo.2013.05.025
- /TRU 14/ Truche, L., Bazarkina, E. F., Barré, G., Thomassot, E., Berger, G., Dubessy, J., Robert, P.: The role of S<sup>-3</sup> ion in thermochemical sulphate reduction: geological and geochemical implications. *Earth and Planetary Science Letters*, 396, 190-200, 2014.

- /UFE 08/ Ufer, K., Stanjek, H., Roth, G., Dohrmann, R., Kleeberg, R., Kaufhold, S.: Quantitative phase analysis of bentonites by the Rietveld method. *Clays and Clay Minerals*, 56(2), 272-282, 2008.
- /VIL 16/ Vilarrasa, V., Rutqvist, J., Blanco Martin, L., Birkholzer, J.: Use of a dual-structure constitutive model for predicting the long-term behavior of an expansive clay buffer in a nuclear waste repository. *International Journal of Geomechanics*, 16(6), D4015005, 2016.
- /VOL 04/ Volckaert, G., Bernier, F., Sillen, X., Van Geet, M., Mayor, J. C., Göbel, I., Blümling, P., Frieg, B. Su, F.: Similarities and differences in the behaviour of plastic and indurated clays. In 6th European Commission Conference on the Management and Disposal of Radioactive Waste (Euradwaste'04), Community Policy and Research & Training Activities (pp. 281-291), 2004.
- /VUL 08/ Vulin, D., Kurevija, T., Golub, M.: Enhanced Geothermal Systems-The Usage of CO<sub>2</sub> as Heat Transmission Fluid. *Energy and The Environment*, 247-258, 2008.
- /WAG 02/ Wagner, W., Pruss, A.: The IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 31, 387-535, 2002.
- /YES 17/ Yeste, M. P., Gatica, J. M., Ahrouch, M., Vidal, H.: Clay honeycomb monoliths as low cost CO<sub>2</sub> adsorbents. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, Bd. 80, S. 415–423, 2017. DOI 10.1016/j.jtice.2017.07.031, 2017.
- /YVO 14/ Yvon-Durocher, G., Allen, A. P., Bastviken, D., Conrad, R., Gudasz, C., St-Pierre, A., Thanh-Duc, N., Del Giorgio, P. A.: Methane fluxes show consistent temperature dependence across microbial to ecosystem scales. *Nature*, 507(7493), 488-491, 2014. DOI: 10.1038/nature13164

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	POLLUX-3-Behälter, mit gezogenen Brennstäben aus 3 DWR-BE /BER 21/ .....	8
Abb. 2.2	Querschnittsprofil der Einlagerungsstrecke mit Ausbau und Gebinde mit bestrahlten Brennelementen für die Streckenlagerung wärmeentwickelnder Abfälle /BGE 22/ .....	9
Abb. 2.3	Allgemeine FEP-Matrix für ein Endlager für radioaktive Abfälle /FRE 20/ .....	14
Abb. 3.1	Ablauf der Relevanzprüfung und Priorisierung .....	19
Abb. 3.2	Komponenten und einwirkende Prozesse in einem Endlagersystem /FRE 20/.....	20
Abb. 3.3	Zeitliche Entwicklung der Temperatur an ausgewählten Bereichen im ELS in Tongesteinsformationen, oben: Auslegungstemperatur 100 °C /ALF 20a/, unten: Auslegungstemperatur 150 °C /ALF 20b/ .....	22
Abb. 5.1	Temperaturabhängige Porositätsverläufe errechnet aus den in /MEL 23/ experimentell bestimmten Permeabilitäten für B25 und Opalinuston .....	46
Abb. 5.2	Expansion, Kontraktion und Wasserfreisetzung im Opalinuston als eine Funktion der Temperatur (vereinfacht nach /JOB 07/)	47
Abb. 5.3	Smektit-Anteil der Smektit-Illit-Wechselagerung einer Bentonit-Formation bzw. eines Tongesteins in Abhängigkeit von der Temperatur /ŠUC 93/.....	48
Abb. 5.4	TUF zur mikrobiellen Aktivität .....	50
Abb. 5.5	Temperaturabhängigkeit des CO <sub>2</sub> -Partialdrucks in Sedimentformationen nach /COU 98/ .....	53
Abb. 5.6	Temperaturabhängigkeit der CO <sub>2</sub> -Produktion durch Kerogenpyrolyse nach /BRU 12/ .....	56
Abb. 5.7	Temperaturabhängigkeit der CO <sub>2</sub> -Desorption nach /YES 17/.....	57
Abb. 5.8	Daten zur Temperaturabhängigkeit der Korrosionsraten für unlegierten Stahl in Salzlösung mit Arrhenius-Fit aus /DIE 88/.....	59
Abb. 5.9	Modellhafte Entwicklung der Porosität in einem Bentonitversatz in einem Endlager im Opalinuston /VIL 16/.....	68

Abb. 5.10	Änderung des Porenvolumens mit dem Illit-Anteil in der Illit-Smektit-Wechsellagerung in einem Tongestein /HUC 21/.....	69
Abb. 5.11	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) im Versatz (ohne Pyrit).....	72
Abb. 5.12	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) im Versatz (mit Pyrit).....	73
Abb. 5.13	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) in der ALZ.....	73
Abb. 5.14	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) im ewG.....	74
Abb. 5.15	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur mikrobiell produzierten Gasmenge (links) und resultierende Gasmenge (rechts) im Versatz.....	77
Abb. 5.16	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur mikrobiell produzierten Gasmenge (links) und resultierende Gasmenge (rechts) in der ALZ.....	78
Abb. 5.17	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Gasmenge (links) und resultierende Gasmenge im Versatz (rechts) (ohne Pyrit).....	80
Abb. 5.18	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Gasmenge (links) und resultierende Gasmenge im Versatz (rechts) (mit Pyrit).....	80
Abb. 5.19	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Gasmenge in der ALZ (links) und resultierende Gasmenge in der ALZ (rechts).....	81
Abb. 5.20	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur H <sub>2</sub> S-Menge (links) und resultierende H <sub>2</sub> S-Menge (rechts) im Versatz (ohne Pyrit).....	82
Abb. 5.21	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur H <sub>2</sub> S-Menge (links) und resultierende H <sub>2</sub> S-Menge (rechts) im Versatz (mit Pyrit).....	83

Abb. 5.22	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur H <sub>2</sub> S-Menge (links) und resultierende H <sub>2</sub> S-Menge (rechts) in der ALZ.....	83
Abb. 5.23	Beitragende primäre TUF (Beiträge gleich gewichtet; links) zur abgeleiteten TUF „Korrosion“ (rechts).....	90
Abb. 5.24	Beitragende primäre TUF (Gewichte in Legende entsprechend der Gasmengenbilanzierung; links) zur abgeleiteten TUF „Korrosion“ (rechts) .....	91
Abb. 5.25	Beitragende primäre TUF (Beiträge gleich gewichtet; links) zur abgeleiteten TUF „Quellfähigkeit“ im Versatz (rechts).....	93
Abb. 5.26	Beitragende primäre TUF (Beiträge gleich gewichtet; links) zur abgeleiteten TUF „Quellfähigkeit“ in der ALZ (rechts) .....	94
Abb. 5.27	Beitragende primäre TUF (Beiträge gleich gewichtet; links) zur abgeleiteten TUF „Quellfähigkeit“ im ewG (rechts).....	94
Abb. 5.28	Beitragende primäre TUF (Gewichte in Legende entsprechend der H <sub>2</sub> S-Mengenbilanzierung; links) zur abgeleiteten TUF „Quellfähigkeit“ im Versatz (rechts) .....	95
Abb. 5.29	Beitragende primäre TUF (Gewichte in Legende entsprechend der H <sub>2</sub> S-Mengenbilanzierung; links) zur abgeleiteten TUF „Quellfähigkeit“ in der ALZ (rechts) .....	95
Abb. 5.30	Beitragende primäre TUF (Gewichte in Legende entsprechend der H <sub>2</sub> S-Mengenbilanzierung; links) zur abgeleiteten TUF „Quellfähigkeit“ im ewG (rechts).....	96
Abb. 5.31	Abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ im Versatz (ohne Pyrit) .....	97
Abb. 5.32	Abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ im Versatz (mit Pyrit) .....	97
Abb. 5.33	Abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ in der ALZ .....	98
Abb. 5.34	Abgeleitete TUF „Fluiddruckänderung“ im ewG .....	98
Abb. 5.35	Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ im Versatz (ohne Pyrit).....	99
Abb. 5.36	Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ im Versatz (mit Pyrit).....	99
Abb. 5.37	Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ in der ALZ .....	100
Abb. 5.38	Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ im ewG .....	100

Abb. 5.39	Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ im Versatz (ohne Pyrit).....	101
Abb. 5.40	Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ im Versatz (mit Pyrit)...	101
Abb. 5.41	Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ in der ALZ .....	102
Abb. 5.42	Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ im Versatz (ohne Pyrit).....	103
Abb. 5.43	Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ im Versatz (mit Pyrit).....	103
Abb. 5.44	Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ in der ALZ.....	104
Abb. 5.45	Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ im ewG.....	104
Abb. 5.46	Abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ im Versatz (ohne Pyrit).....	105
Abb. 5.47	Abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ im Versatz (mit Pyrit).....	105
Abb. 5.48	Abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ in der ALZ.....	106
Abb. 6.1	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Behälter (rechts) Variante 1 .....	111
Abb. 6.2	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Versatz (rechts) Variante 1 .....	111
Abb. 6.3	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für die ALZ (rechts) Variante 1 .....	112
Abb. 6.4	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den ewG (rechts) Variante 1 .....	112
Abb. 6.5	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Behälter (rechts) Variante 2 .....	113
Abb. 6.6	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Versatz (rechts) Variante 2 .....	113
Abb. 6.7	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für die ALZ (rechts) Variante 2.....	114
Abb. 6.8	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den ewG (rechts) Variante 2.....	114
Abb. 6.9	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für den Versatz (rechts) Variante 1 .....	115
Abb. 6.10	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für den Versatz (rechts) Variante 2 .....	115

Abb. 6.11	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für die ALZ (rechts).....	116
Abb. 6.12	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für den ewG (rechts).....	116

## Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Temperaturbeeinflusste Komponenten und deren Bezeichnungen in /FRE 20/ für Tongestein.....	23
Tab. 5.1	Primäre TUF für das Wirtsgestein Tongestein .....	35
Tab. 5.2	Bewertung der primären TUF für das Wirtsgestein Tongestein .....	64
Tab. 5.3	Identifizierte Bilanzierungsgrößen mit den beitragenden primären TUF .....	66
Tab. 5.4	Abgeleitete TUF für das Wirtsgestein Tongestein .....	85
Tab. 5.5	Beziehungen zwischen den primären TUF und den Bilanzierungsgrößen bzw. abgeleiteten TUF.....	86
Tab. 7.1	Günstige Temperaturbereiche für die Integrität der Komponenten im Wirtsgestein Tongestein (Variante 1 <sup>***</sup> ).....	118
Tab. 7.2	Günstige Temperaturbereiche für die Integrität der Komponenten im Wirtsgestein Tongestein (Variante 2 <sup>***</sup> ).....	118

## Abkürzungsverzeichnis

<b>ALZ</b>	Auflockerungszone
<b>BE</b>	Brennelemente
<b>BGE</b>	Bundesgesellschaft für Endlagerung
<b>BGR</b>	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe
<b>DWR</b>	Druckwasserreaktor
<b>ELS</b>	Endlagersystem
<b>ELK</b>	Endlagerkonzept
<b>ESK</b>	Entsorgungskommission
<b>EndSiAnfV</b>	Endlagersicherheitsanforderungsverordnung
<b>EndSiUntV</b>	Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung
<b>ewG</b>	Einschlusswirksamer Gebirgsbereich
<b>FEP</b>	Features, Events and Processes
<b>GRS</b>	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH
<b>GTUF</b>	Gesamttemperaturunverträglichkeitsfunktion
<b>IFEP</b>	Internationalen FEP-Liste der OECD/NEA
<b>RN</b>	Radionuklid
<b>StandAG</b>	Standortauswahlgesetz
<b>SWR</b>	Siedewasserreaktor
<b>THMCB</b>	Thermisch, hydraulisch, mechanisch, chemisch, biologisch
<b>TUF</b>	Temperaturunverträglichkeitsfunktion
<b>VSG</b>	Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben
<b>WG</b>	Wirtsgestein
<b>WWER</b>	Wasser-Wasser-Energie-Reaktor

**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](http://www.grs.de)