

**Ableitung der
wirtsgesteinsspezifischen
Temperaturverträglichkeit
von Endlagerkomponenten**

Steinsalz

Ableitung der wirtsgesteinsspezifischen Temperaturverträglichkeit von Endlagerkomponenten

Steinsalz

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 Steinsalz 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 Steinsalz.

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 Steinsalz. Diese Auswertung ist als Beitrag der Autoren zur Diskussion zu den Grenztemperaturen zu verstehen. Die Bewertung wird dabei aus Sicht der Langzeitsicherheit des Endlagersystems durchgeführt und bezieht alle im Endlager ablaufenden Prozesse mit ein.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Anforderungen und Vorgehen.....	3
2	Prüfungsgrundlage	7
2.1	Einlagerungskonzept für das Wirtsgestein Steinsalz.....	7
2.2	FEP-Liste.....	11
2.3	Randbedingungen und Prämissen	15
3	Relevanzprüfung	19
3.1	Komponentenspezifische Prüfung	20
3.2	Prozessgruppenspezifische Prüfung.....	23
3.3	Einlagerungskonzeptspezifische Prüfung	26
3.4	Prozessspezifische Prüfung.....	26
4	Priorisierung	29
5	Ableitung von TUF	31
5.1	Primäre TUF	31
5.1.1	Thermische Zersetzung	42
5.1.2	Mineralumwandlung.....	43
5.1.3	Kornbruch.....	43
5.1.4	Migration von Fluideinschlüssen	44
5.1.5	Kompaktion (Kriechbeschleunigung).....	44
5.1.6	Kriechfähigkeit	45
5.1.7	Lösungsdruck	45
5.1.8	Gasdruck	46
5.1.9	Behälterabsinken	46
5.1.10	Korrosionsrate	46
5.1.11	Korrosionsrate durch H ₂ S	47
5.1.12	Versprödungsrate	48

5.1.13	Mikrobielle Aktivität	48
5.1.14	Thermochemische Sulfatreduktion.....	49
5.1.15	Viskosität	49
5.1.16	Dichte	50
5.1.17	Rückhaltung.....	51
5.1.18	Diffusionskoeffizient.....	51
5.1.19	RN-Konzentration	51
5.1.20	Tortuosität (Kanalisation).....	52
5.1.21	Thermische Osmose.....	52
5.1.22	Bewertung des Wissenstandes zu den primären TUF	52
5.2	Bilanzierungsgrößen.....	54
5.3	Abgeleitete TUF	63
5.3.1	Mikrobiell beeinflusste Korrosion	66
5.3.2	Korrosion	67
5.3.3	Korrosion durch H ₂ S	67
5.3.4	Lösungsdruckänderung	68
5.3.5	Gasdruckänderung	69
5.3.6	Kompaktion (Kriechbeschleunigung).....	69
5.3.7	Kriechfähigkeit (Steinsalz)	70
5.3.8	Thermische Zersetzung	71
5.3.9	Kornbruch.....	72
5.3.10	Behälterabsinken	72
5.3.11	Advektion / Dispersion (Lösung)	73
5.3.12	Advektion / Dispersion (Gas)	74
5.3.13	Diffusion (Lösung).....	76
5.3.14	Diffusion (Gas).....	77
6	Ableitung der GTUF.....	79
6.1	Wichtung	79
6.2	Ableitung der GTUF für einzelne Komponenten.....	82

7	Ableitung des günstigen Temperaturbereichs für das Gesamtsystem	87
7.1	Temperaturverträglichkeit mit den beschriebenen Prämissen	87
7.2	Ausblick und weitere Arbeiten.....	89
8	Literatur.....	91
	Abbildungsverzeichnis.....	99
	Tabellenverzeichnis.....	101
	Abkürzungsverzeichnis.....	103

1 Einleitung

Der vorliegende Bericht beschreibt die Methodik zur Ableitung der Temperaturverträglichkeiten von Endlagerkomponenten bei der Einlagerung hochradioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Steinsalz. Zusätzlich zu diesem Bericht zum Wirtsgestein „Steinsalz“ wurden ebenfalls Temperaturverträglichkeiten von Endlagerkomponenten für die Wirtsgesteine „Tongestein“ /CZA 24a/ und „Kristallin“ /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 Steinsalz. 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 Steinsalz. 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 Steinsalzformation 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. 0): 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. 1): 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. 1). Durch Minimierung einer Gesamttemperaturunverträglichkeitsfunktion (GTUF) ergibt sich für jede Komponente ein günstiger Temperaturbereich (Kap. 6).
4. Synthese (Kap. 7): Verbal-argumentative Zusammenführung der Ergebnisse und Begründung eines günstigen Temperaturbereichs für das zugrunde gelegte ELS.

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

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

Als Definitionsintervall der TUF wird der Temperaturbereich zwischen 35 °C und 250 °C betrachtet. Die untere Grenze von 35 °C wird als Gebirgstemperatur interpretiert, welche im ELS (unter Ausschluss von Frostprozessen) nicht unterschritten werden kann. Bei der Wahl der oberen Grenze wurden im ELS Prozesse berücksichtigt, die bei sehr hohen Temperaturen auftreten und integritätsrelevante Eigenschaften des ewG beeinträchtigen, d. h. die Grenze von 250 °C wurde aufgrund der Kristallwasserfreisetzung von Polyhalit, welche oberhalb von 230 °C beginnt /JOC 81/, /ROT 86/, /KUH 13/ festgelegt.

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 Steinsalz**

Die der Analyse einer günstigen Temperatur zugrunde liegende technische Auslegung des Endlagers basiert auf dem Konzept der Streckeneinlagerung von POLLUX-10-Behältern der vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) in steiler Lagerung der Salzformation /BOL 11/, für die flache Lagerung erfolgte eine Diskussion dieses Konzepts in /BOL 18/. Die Ausführungen zur Auslegung und zum Betrieb des Endlagers sind aus /BGE 22/ übernommen¹.

Der POLLUX-10-Behälter besteht aus einem Innenbehälter aus Feinkornbaustahl (Werkstoff 1.6210) mit einer Wandstärke von 160 mm und einem Außenbehälter aus Sphäroguss (Werkstoff 0.7040) mit einer eine Wandstärke von ca. 270 mm. Der Innenbehälter wird durch einen geschraubten Primärdeckel und einen geschweißten Sekundärdeckel dicht verschlossen. Der Innenraum ist in fünf Kammern unterteilt, in die je eine Brennstabbüchse mit Brennstäben von zwei DWR-BE oder sechs SWR-BE eingesetzt werden kann /BOL 08/, /BGE 22/. In Abb. 2.1 ist ein POLLUX-10-Behälter mit gezogenen Brennstäben aus zehn DWR-BE dargestellt. De äußere Abschirmbehälter muss keine Dichtfunktion übernehmen und wird mit einem verschraubten Deckel verschlossen. Im Mantel in radial verteilten Bohrungen sind Stäbe aus Polyethylen zur Verringerung der Neutronendosisleistung eingesetzt /BGE 22/.

¹ 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 Salzgestein verwendet /BGE 22/.

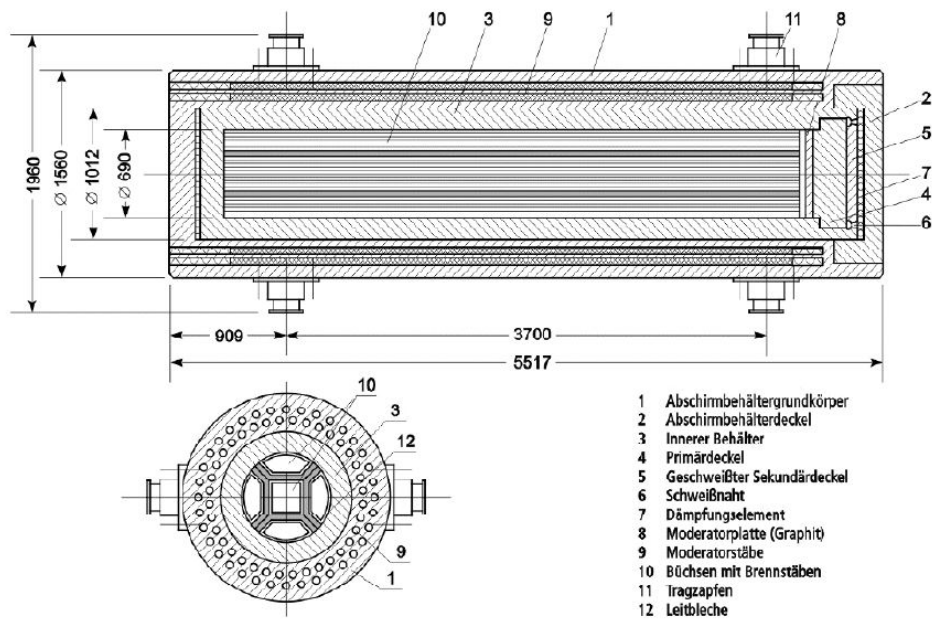


Abb. 2.1 POLLUX-10-Behälter, mit gezogenen Brennstäben aus 10 DWR-BE /BGE 22/

Die Einlagerungsfelder liegen im Steinsalz, wobei im Steinsalz geringe Beimengen an Anhydrit und Polyhalit zu unterstellen sind. Eine Steinsalzformation ist in der Regel der Bestandteil eines Evaporationszyklus, der auch andere Formationen enthält – u.a. mit Anhydrit und Carnallitit. Für die folgende Analyse wird unterstellt, dass ein ausreichender Abstand zu Anhydrit und Carnallitit eingehalten wird (siehe Randbedingungen und Prämissen, Kap. 2.3).

Zur Lagestabilisierung des Behälters wird die Sohle aus Steinsalz der Form des Endlagergebundes angepasst, sodass das Endlagergebände ca. 5 cm in der Sohle versenkt wird (Abb.2.2).

Nach der Einlagerung erfolgt die Verfüllung des Hohlraums mit bergfeuchtem Salzgrus, damit der Behälter allseitig von Steinsalz umgeben ist. Ein wesentlicher Vorteil bei der Verwendung von Salzgrus als Versatzmaterial besteht in der Einschlusswirkung, die durch Kriechkompaktion erreicht wird /MEL 16/. Der Versatz erfolgt sukzessive: innerhalb der Einlagerungsstrecken wird der Hohlraum um ein Endlagergebände herum direkt nach dessen Einlagerung verfüllt. Querschläge und Abschnitte der Richtstrecken werden verfüllt, sobald sie für den Betrieb des Endlagers nicht mehr notwendig sind. Auch in den Richtstrecken wird bergfeuchter Salzgrus verwendet, um keine weitere Feuchtigkeit in den Einlagerungsbereich einzutragen /BGE 22/.

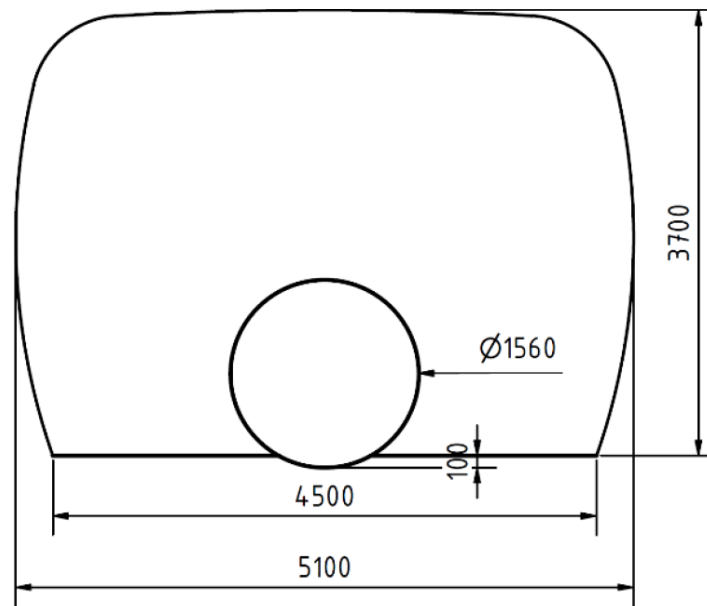


Abb. 2.2 Querschnittsprofil der Einlagerungsstrecke für die Streckenlagerung wärmeentwickelnder Abfälle /BGE 22/

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 Endlagergebinden und der anschließenden Verfüllung von Einlagerungsstrecken, Querschlägen und nicht weiter genutzten Teilen der Richtstrecken. Der Betrieb beginnt im schachtfürnsten 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 Endlagergebindertransportschacht aus dem Endlager geleitet.

Der Einlagerungsbetrieb transportiert die Endlagergebände über den Endlagergebindertransportschacht 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, 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 verfüllt. 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 Endlagergebänden 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 werden kombinierte Sorelbeton-Salzgrus-Verschlüsse zur Abdichtung des Einlagerungsbereiches gegen den Infrastrukturbereich eingesetzt, die einen Zutritt von Salzlösung und einen Austritt von Gasen unterbinden. Zwischen zwei primären Dichtelementen aus Sorelbeton, die gegenüber Lösung aus einer Salzformation mit Carnallit-Flöz ($MgCl_2$ -Lösung) chemisch stabil sind, erfolgt eine Verfüllung aus angefeuchtetem Salzgrus, sodass eine schnelle Kompaktion in diesem Bereich begünstigt wird. Für jede Richtstrecke werden zwei dieser Dichtelemente vorgesehen. Im Infrastrukturbereich wird zur Pufferung von möglicher zutretender Lösung aus den Schächten poröses Material, wie Schotter, eingebracht. Das so entstehende Speichervolumen verzögert einen Zutritt von Lösungen zu den Barrieren /BGE 22/. Der Schachtverschluss setzt sich aus Dichtelementen Widerlager und Filterschichten zusammen (siehe /BER 2020c/).

2.2 FEP-Liste

Die Analyse einer FEP-Liste wird gemäß Begründungstext der EndlSiAnfV 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 ihren Eigenschaften (Features) sowie den darauf einwirkenden Ereignissen (Events) und Prozessen (Processes). Die Fragmentierung des ELS erlaubt die einfachere Analyse zur Entwicklung dieser Prozesse im ELS. Nach Analyse der einzelnen Bausteine des ELS können daraus Rückschlüsse zum Gesamtsystem gezogen werden.

Als Standard wird international die abgestimmte FEP-Liste der OECD/NEA anerkannt /NEA 19/. Basierend auf dieser Liste wurde in /FRE 20/ eine FEP-Matrix erstellt (Abb. 2.3). 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 Prozesse², die eine Bewertung der zugrunde liegenden Prozesse in einem ELS in größerer Detailtiefe erlaubt. Diese größere Detailtiefe ermöglicht auch eine bessere Bewertung von Kopplungen zwischen den Prozessen. Es muss hier angemerkt werden, dass im Rahmen dieses Vorhabens

² 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.

ausschließlich des Systems zur Identifikation der FEP nach /FRE 20/ verwendet worden ist. Das System ordnet alle FEP in der Matrix gemäß folgendem Schema:

KK.XX.PP.YY.a

KK: Bezeichnung der übergeordneten ELS-Komponente

XX: Identifikationsnummer der ELS-Komponente

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

YY: Identifikationsnummer der Eigenschaft-, Ereignis, Prozessgruppe

a: Assoziierter Prozess

Dieses Nummerierungssystem erlaubt die schnelle Zuordnung der Eigenschaften, Ereignisse und Prozesse anhand der FEP-Nummern. Die Abkürzungen können Abb. 2.3 entnommen werden. Beispielsweise steht „BB“ für Buffer and Backfill (Buffer und 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-, 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.

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 worden und bilden die Grundlage der Relevanzprüfung und der Priorisierung. Es muss an dieser Stelle angemerkt werden, dass die Datensätze einer Konsistenzprüfung unterzogen worden sind, um die Vollständigkeit der Datensätze sicherzustellen. Die Prüfung bestand zunächst in dem Vergleich, ob die assoziierten Prozesse, die in einem FEP in einer

Komponente aufgelistet sind, gleich oder ähnlich in einem gleichlautenden FEP in einer anderen Komponente aufgelistet sind. Gegebenenfalls sind die fehlenden assoziierten Prozesse in den entsprechenden Komponenten hinzugefügt worden. Zudem umfasste die Prüfung den Vergleich mit anderen FEP-Katalogen z.B. /BRA19/, um gänzlich fehlende assoziierte Prozesse (z.B. Pyrolyse, Quarzzementation) zu identifizieren und hinzuzufügen.

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

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

2.3 Randbedingungen und Prämissen

Für die Durchführung der Untersuchungen ist es notwendig, einige Randbedingungen bzw. Prämissen festzulegen. Die Prämissen unterscheiden sich teilweise für die verschiedenen Wirtsgesteine, sie sind daher nicht in jedem Fall allgemeingültig. Im folgenden Kapitel werden für das Endlagersystem im Wirtsgestein Steinsalz die wesentlichen Prämissen eingeordnet und erläutert; bezüglich der umfassenden Auflistung der Prämissen für die Endlagersysteme in den Wirtsgesteinen Tongestein 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 v. a. formuliert, um die Variabilität der Endlagersysteme einzugrenzen. Die Prämissen (d) folgen zumeist dem Ausschließen bzw. der geringfügigen Einwirkung eines Prozesses oder Prozessablaufes.

Eine der Prämissen für den konzeptuellen Modellansatz betrifft die Abgrenzung der Komponenten Auflockerungszone (ALZ) und einschlusswirksamer Gebirgsbereich (ewG): Das unverritzte Salzgestein, welches als ewG ausgewiesen werden kann, liegt vor, wenn über größere Bereiche kein vernetzter Porenraum im Wirtsgestein vorliegt. Im ewG sind weder Lösungsbewegung noch advektiver und konvektiver Stofftransport von relevantem Einfluss. Diffusion findet statt, es wird jedoch unterstellt, dass der diffusive Stofftransport im unverritzten Steinsalz eine vernachlässigbare Rolle spielt.

Diese Art der Unterscheidung zwischen der ALZ und dem ewG impliziert, dass die Rissbildung im unverritzten Gestein eines ewG zu einer Ausweitung der ALZ und das Verheilen bzw. Verschließen einer ALZ zur Vergrößerung des ewG führt. Die Grenze zwischen ALZ und ewG ist somit dynamisch, die genaue Festlegung der Grenze ist für die Ableitung von Temperaturverträglichkeiten unerheblich.

Es wird unterstellt, dass das unverritzte Gestein gasdicht ist. Des Weiteren wird davon ausgegangen, dass die vorhandene Gasmenge und das durch Korrosionsprozesse gebildete (H_2) Gas über den Versatz, die ALZ und das Verschlussystem abfließen kann.

Prämissen für die Standortbedingungen im Wirtsgestein Steinsalz betreffen beispielsweise die Gesteinsformation für die Ausweisung des ewG: Es wird unterstellt, dass die Mächtigkeit der Steinsalzformation bzw. die Entfernung der Auffahrungen von Kalisalzflözen (z.B. Carnallit), Anhydritlagen (z.B. Hauptanhydrit) und Tonschichten hinreichend groß ist, um die Relevanz der Einwirkungen von Kalisalzen, Anhydrit/Gips und Tonmineralen als vernachlässigbar einzustufen.

Prämissen für das Einlagerungskonzept im Wirtsgestein Steinsalz betreffen u. a. auch den Versatz aus Salzgrus: Es wird unterstellt, dass der Salzversatz arteigen, klassiert und bergfeucht ist. Das bedeutet, dass das Salzhaufwerk aus der Auffahrung dieses Endlagerbergwerks stammt, dass deren Korngrößenverteilung und mineralogische Zusammensetzung durch technische Prozesse „eingestellt“ wird – z. B. große Mengen an Anhydrit/Gips und Tonminerale weitgehend entfernt werden –, und dass Salzgrus nach dem Einbau die mittlere Luftfeuchtigkeit in der Grube aufweist. Für die Versatzkörper wird u. a. eine anhaltend formschlüssige Anbindung an die Kontur der Grubenräume unterstellt, so dass Einwirkungen durchgehender Firstspalten – u. a. als bevorzugter Transportpfad – infolge der Setzung des Versatzes als vernachlässigbar einzustufen sind.

Die prozessspezifischen Prämissen umfassen u. a. Prozessabläufe in allen Komponenten vom Behälter bis zum ewG, die bei der Bewertung der Temperatur(un)verträglichkeit keine Berücksichtigung finden. Stellvertretend sind hier genannt:

- In der Komponente Behälter(oberfläche) wird der Prozess aerobe Metallkorrosion für die integritätsrelevanten Eigenschaften vernachlässigt, da die Redoxbedingungen nur einen kurzen Zeitraum (Wochen bis Monate) unmittelbar nach dem Verschließen eines Einlagerungsorts aufgrund des Sauerstoffverbrauchs anhalten; für RN-transportrelevante Eigenschaften werden die Einwirkungen in benachbarten Komponenten (Versatz, ALZ) berücksichtigt.
- In den Komponenten Versatz und ALZ werden die Prozesse der Auflösung und der Ausfällung von Salzmineralen für integritätsrelevante Eigenschaften als vernachlässigbar eingestuft (vgl. die Prämisse arteigener Salzgrus).

- In der Komponente ALZ (und weiteren) werden Interaktionen zwischen Gas- und Lösungsphase sowohl für integritätsrelevante als auch für RN-transportrelevante Eigenschaften wegen Geringfügigkeit der Fluidmengen vernachlässigt.
- In der Komponente Wirtsgestein (ewG) werden die Gasbildung durch Zersetzung organischer Stoffe, thermolabile Phasen und Pyrolyse für integritätsrelevante und RN-transportrelevante Eigenschaften aufgrund der umfassenden Erkundung der Gesteinsbereiche als vernachlässigbar bewertet.

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. 1) und der Ableitung von TUF (Kap. 1). 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 von dem Wärmeeintrag beeinflussten Komponenten stattfinden (Komponentenspezifische Prüfung; Reiter "Features & Components"), (2) sich auf die Temperaturabhängigkeit der Prozessgruppe bzw. der assoziierten Prozesse bzw. auf die temperaturabhängigen Eigenschaften der Komponente beziehen (Prozessgruppenspezifische Prüfung: Reiter "Chara., Processes & Events" und "Prüfung Temperatur"), (3) potenziell in der ELS-Komponente stattfinden (Einlagerungskonzeptspezifische Prüfung: Reiter "Salz"), oder (4) einen potenziell bedeutsamen Einfluss auf die Komponente aufweisen (Prozessspezifische Prüfung; Reiter "Salz").

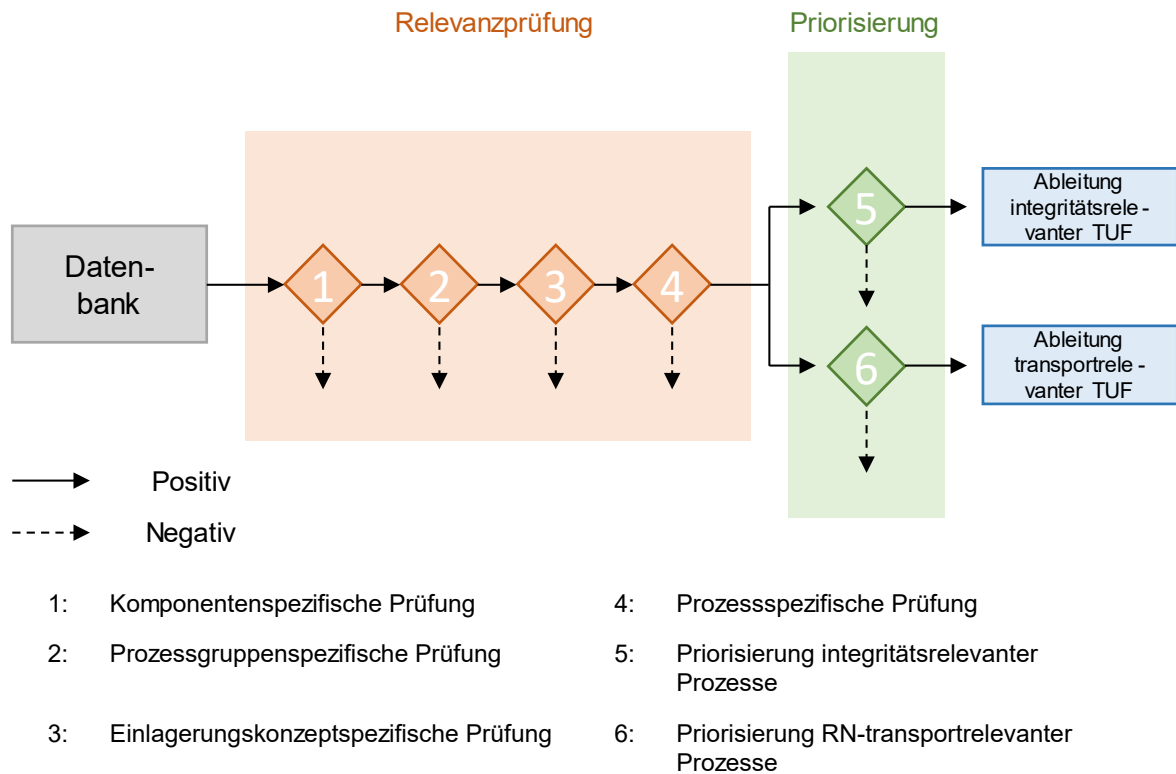


Abb. 3.1 Ablauf der Relevanzprüfung und Priorisierung

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.

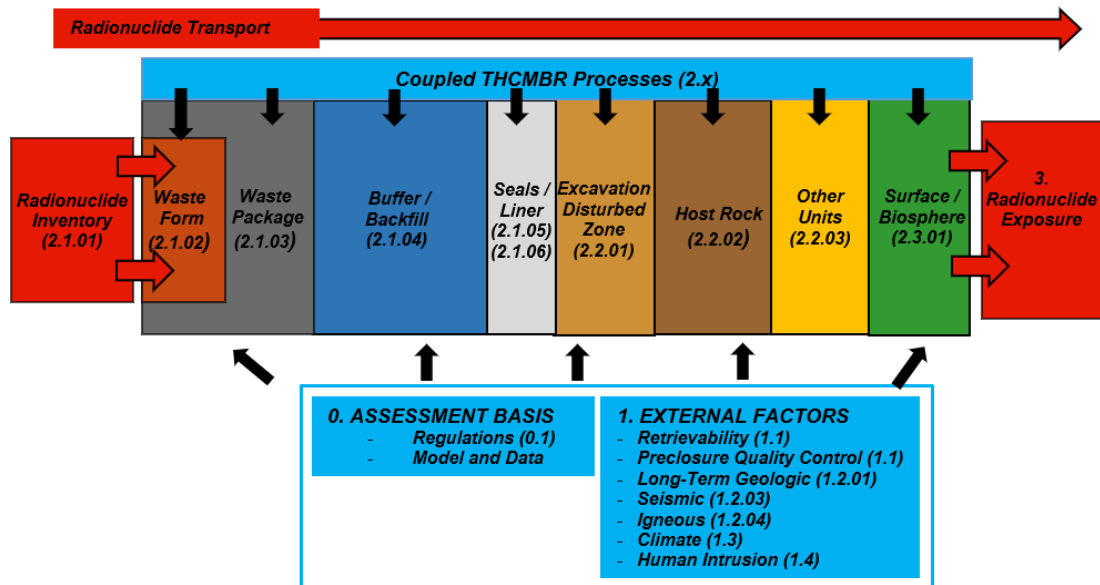


Abb. 3.2 Komponenten und einwirkende Prozesse in einem Endlagersystem /FRE 20/

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

- die signifikante Abweichung von der ursprünglichen Temperatur im unverritzten 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 50 m Entfernung von den Abfällen eine signifikante Erhöhung des Temperaturmaximums von bis zu 30 °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.

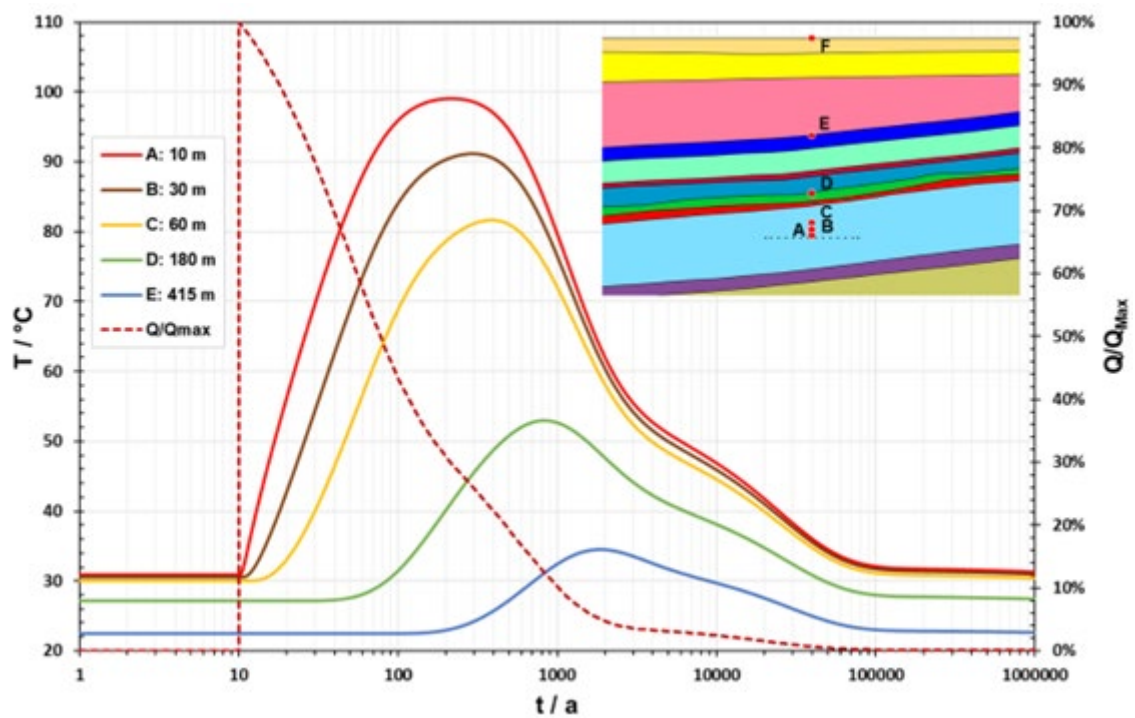
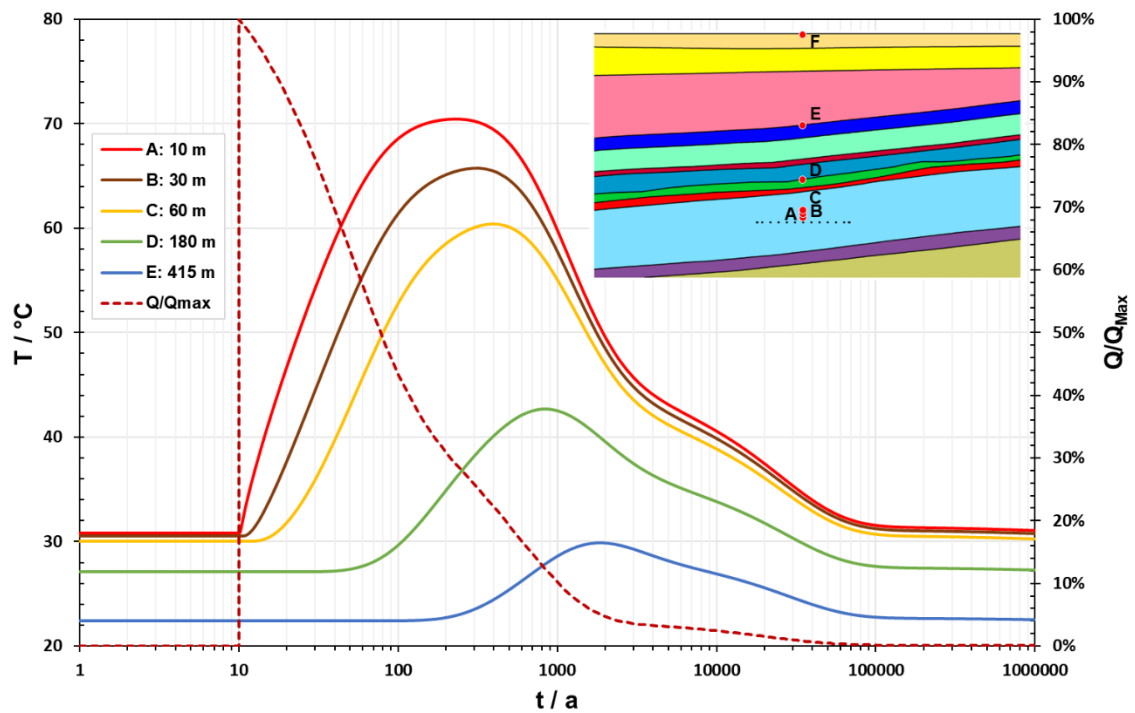


Abb. 3.3 Zeitliche Entwicklung der Temperatur an ausgewählten Bereichen in einem ELS in flach lagernden Salzformationen, oben: Auslegungstemperatur 100 °C /BER 20a/, unten: Auslegungstemperatur 150 °C /BER 20b/

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/

Komponente	Bezeichnung in FEP-Matrix	ID in FEP-Matrix
Behälter	Waste Package	WP.00
Versatz	Buffer/Backfill	BB.00 BB.01
Streckenausbau	Mine Workings	
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 des 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 diese Komponente (SP.01, SP.03) für die weitere Analyse entfällt. Darüber hinaus wurden die Komponenten MW.00 – 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 Prozesse³

Folgende Prozessgruppen aus /FRE 20/ werden nicht ausgewertet:

- Langzeitliche **geologische Prozesse** (LG): Die relevante Wärmeentwicklung durch die hochradioaktiven Abfälle liegt in der Größenordnung von ca. 30.000 Jahre. Langzeitlich wirkende geologische Prozesse (z.B. Hebung/Senkung des Standortes) 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 die hochradioaktiven Abfälle liegt in der Größenordnung von ca. 30.000 Jahre. Klimatische Prozesse (z.B. glaziale Erosion/Rinnenbildung) werden aber erst mit Einsetzen der nächsten Kaltzeit (wird frühestens in 50.000 Jahren erwartet /GAN 16/) wirksam werden, so dass sie für die Ableitung einer günstigen geologischen Temperatur keine Rolle spielen sollten.
- **Zukünftige menschliche Aktivitäten** (HP, HE): Zukünftige menschliche Aktivitäten, die im Zusammenhang mit dem ELS stehen, können aus heutiger Sicht

³ Radiologischen Prozesse sind keine thermischen Prozesse, können jedoch mit diesen Prozessen gekoppelt sein.

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 auf Grund 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 auch 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 Detektionsmöglichkeiten 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 einlagerungskonzeptspezifische 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 Bildung turbulenter Strömungen sind Beispiele für Prozesse mit einem Bezug zu anderen Endlagerkonzepten; Smektit-Illit-Reaktionen im Versatz (im Salz) und Matrixdiffusion im einlagerungswirksamen Gebirgsbereich (im Salz) sind Beispiele für Prozesse, welche aufgrund des zugrunde gelegten Einlagerungskonzeptes nicht auftreten können; Plastische Verformungen und Versagen des Behälters sind Beispiele für Prozesse, die mittels der Auslegung vermieden werden müssen.

3.4 Prozessspezifische Prüfung

Die prozessspezifische Prüfung beabsichtigt festzustellen, ob der assoziierte Prozess unter Berücksichtigung des zugrunde gelegten Einlagerungskonzeptes einen potenziellen 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-bedeutende assoziierte Prozesse sind alle diejenigen, die advektiven Stofftransport im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (im Salz) beinhalten. Es wird in der Komponente lediglich diffusiver Stofftransport erwartet.

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. 1 aufgeführten Prozessen zu finden.

5 Ableitung von TUF

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

5.1 Primäre TUF

Sobald bei der Priorisierung ein in der betreffenden Komponente stattfindender Prozess oder eine Komponenteneigenschaft identifiziert wird, welche die Temperaturunverträglichkeit dieser oder einer benachbarten Komponente bzw. den RN-Transport dort 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. hier davon ausgegangen, dass mit Hilfe der primären TUF „Kompaktion (Kriechbeschleunigung)“, „Kriechfähigkeit“, „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 sowie mithilfe der Kozeny-Carman-Beziehung über die Permeabilität ein. Die Porosität wird hier allerdings als nicht unabhängig betrachtet, weil ihre temperaturbedingten Änderungen durch andere primäre TUF, wie „Kriechfähigkeit“ 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 dieser Viskosität abweichen kann.

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

Einem Prozess können mehr als eine primäre TUF zugeordnet werden. Beispielsweise können dem Prozess „Flächenhafte Korrosion“ hinsichtlich der integritätsrelevanten Eigenschaften der Komponente WP.00 (Behälter) die primären TUF „Korrosionsrate“ und „Korrosionsrate durch H₂S“, zugeordnet werden, weil die Temperaturabhängigkeit der Rate bzw. der Ausprägung dieses Prozesses durch die bekannten Korrosionsraten aufgrund der Wechselwirkung mit H₂S oder die Spaltung von Wasser abgebildet werden kann. Die mit der Korrosion einhergehende Bildung von H₂ und der Wasserverbrauch werden nicht als primäre TUF betrachtet, weil ihre Raten mit den entsprechenden Korrosionsraten gleichgesetzt werden und somit von den 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 „Kriechfähigkeit“ die Prozesse „Spannungsänderung durch Gasdruck“, „Spannungsänderung durch Lösungsdruck“, „Thermisch-beschleunigtes Kriechen“ und „Thermische Änderung der mechanischen Eigenschaften“ ab. Kann jedoch der temperaturabhängige Beitrag eines Prozesses zur bereits für einen anderen Prozess zugeordneten TUF mit dem aktuellen Kenntnisstand oder bei den vorausgesetzten Randbedingungen noch nicht quantifiziert werden, wird diesem Prozess ein potenzieller Beitrag als eine Vorlage bzw. ein Merkposten für eine evtl. Berücksichtigung zu einem späteren Zeitpunkt bescheinigt. Beispielsweise kann der Beitrag des Prozesses „Physisorption (immobiler Phasen)“ zu der 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. „Thermische Zersetzung“, „Kornbruch“ oder „Thermochemische Sulfatreduktion“, hergeleitet. Dabei kann die funktionelle Temperaturabhängigkeit der primären TUF entweder allgemein gültig (z. B. „Diffusionskoeffizient“) oder standort- bzw. einlagerungskonzeptabhängig sein. Zum Beispiel hängt die Form der standortabhängigen primären TUF „Thermische Zersetzung“ von Vorkommen und Verfügbarkeit unterschiedlicher wasserhaltiger Minerale (Polyhalit, Gips, Bassanit, Carnallit, Kieserit u. A.) ab, und die Form der primären TUF „Kornbruch“ von der Bildungstemperatur der Fluideinschlüsse, die anhand der Homogenisierungstemperatur im Labor ermittelt werden kann. Die Form der einlagerungskonzeptabhängig 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 Maße mit Einbezug von Expertenmeinungen festgelegt werden. Zum Beispiel erfolgte die Herleitung der standortabhängigen primären TUF „Kornbruch“ anhand der Ergebnisse bei der maximal erreichten In-situ-Versuchstemperatur von 200°C im steillagernden Steinsalz des Salzbergwerkes ASSE /ROT 88/. Für diesen Prozess wird im flachlagernden Steinsalz am Standort des WIPP aber eine Temperatur von 250°C ausgewiesen /KUH 13/. Entsprechend dieser Ungewissheit von 50°C (Experteneinschätzung) wurde die Temperaturbandbreite für diesen Prozess auf 150 bis 250°C festgelegt. Gleichwohl wurden für ein steillagerndes Zechstein-Steinsalz in Dänemark zwei Fluideinschlusspopulationen mit mittleren Homogenisierungstemperaturen von $73 \pm 6^\circ\text{C}$ (Wertebereich von 29 bis 125°C) und $203 \pm 2^\circ\text{C}$ (Wertebereich von 190 bis 223 °C) beobachtet /FAB 83/.

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 daraus 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 Steinsalz identifizierten primären TUF zusammen mit den durch sie abgebildeten Prozessen auf.

Tab. 5.1 Primäre TUF für das Wirtsgestein Steinsalz

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
<i>integritätsrelevante TUF</i>		
Thermische Zersetzung	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 A Alteration von Mineralen BB.01.TC.02 D, HR.01/HR.02.TC.02 B Volumenänderung / Rissbildung durch Alteration von Mineralen
Mineralumwandlung	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 A Alteration von Mineralen BB.01.TC.02 D, HR.01/HR.02.TC.02 B Volumenänderung / Rissbildung durch Alteration von Mineralen BB.01/HR.01.TC.01 I Lösungsinteraktion mit Korrosionsprodukten des Behälters BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 C Mineralauflösung und -auslaugung
Kornbruch	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TH.07 F Kornbruch und Fluidmigration
Migration von Fluideinschlüssen	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TH.07 F Kornbruch und Fluidmigration
Kompaktion (Wärmedehnung)	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01.TM.05 A, HR.01/HR.02.TM.06 B Thermische Expansion und Kontraktion
Kompaktion (Kriechbeschleunigung)	BB.01	BB.01.TM.05 D Salzkriechen

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
Kriechfähigkeit	HR.01/ HR.02	HR.01.TM.04 A Spannungsänderung durch Gasdruck HR.01.TM.05 A Spannungsänderung durch Lösungsdruck HR.01/ HR.02.TM.06 A Thermisch-beschleunigtes Kriechen HR.02.TM.06 C Thermische Änderung der mechanischen Eigenschaften
Behälterabsinken	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01.TM.07 G Behälterabsinken HR.01/ HR.02.TM.07 F Behälterabsinken
Lösungsdruck	BB.01/ HR.01	BB.01/ HR.01.TH.01 A Druckgetriebene Strömung (Lösung) BB.01/ HR.01.TH.01 B Druckgetriebene Strömung (Gas) BB.01.TM.04 C Spannungsänderung durch Lösungsdruck HR.01.TH.01 C Druckgetriebene Strömung (weitere Phasen)
Gasdruck	BB.01/ HR.01	BB.01/ HR.01.TH.01 A Druckgetriebene Strömung (Lösung) BB.01/ HR.01.TH.01 B Druckgetriebene Strömung (Gas) BB.01.TM.06 A Spannungsänderung durch Gasdruck HR.01.TH.01 C Druckgetriebene Strömung (weitere Phasen)
Korrosionsrate	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.TB.03 A Mikrobiell beeinflusste Korrosion WP.00.TC.02 A Gasbildung aus der anaeroben Metallkorrosion WP.00.TC.03 C Flächenhafte Korrosion

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		WP.00.TC.03 D Bildung und Stabilität der Passivierungsschicht WP.00.TC.04 A/B, WP.00.TC.05 A/B/C, WP.00.TC.08 A Lokale Korrosionsprozesse*
Korrosionsrate durch H ₂ 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.TB.03 A Mikrobiell beeinflusste Korrosion 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/C, WP.00.TC.08 A Lokale Korrosionsprozesse*
Versprödungsrate	WP.00	WP.00.RA.02 A Versprödung des Behälters durch Strahlung WP.00.TC.06 A/B/C Wasserstoff-Versprödung WP.00.TM.02 C Versprödung des Behälters durch lokale Korrosion
Mikrobielle Aktivität	WP.00/ BB.01/ HR.01	BB.01/HR.01.TB.01 H Mikrobielle Gasbildung WP.00.TB.03 A Mikrobiell beeinflusste Korrosion
Thermochemische Sulfatreduktion	BB.01/ HR.01	BB.01/HR.01.TC.01 M/L Thermochemische Sulfatreduktion
<i>RN-transportrelevante TUF</i>		
Viskosität	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01.TH.07 C Dichte- und Viskositätsänderungen der Fluide BB.01/HR.01.TT.01A Advektion (Lösung)

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01/HR.01.TT.01B Dispersion (Lösung) BB.01/HR.01.TT.01C Diffusion (Lösung) BB.01/HR.01.TT.04C RN-Transport durch Konvektion BB.01/HR.01.TT.05A Advektion (Gas) BB.01/HR.01.TT.05B Diffusion (Gas) HR.02.TT.01 C Diffusion (Lösung) HR.02.TT.05 B Diffusion (Gas)
Dichte	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01.TC.01 C Auflösung BB.01/HR.01.TC.01 J Lösungsinteraktion mit eindringenden Lösungen aus anderen Komponenten BB.01/HR.01.TC.02 C Mineralauflösung und -auslaugung BB.01/HR.01.TH.03 A Freie Konvektion BB.01/HR.01.TH.07 C Dichte- und Viskositätsänderungen der Fluide BB.01/HR.01.TT.01A Advektion (Lösung) BB.01/HR.01.TT.01B Dispersion (Lösung) BB.01/HR.01.TT.01C Diffusion (Lösung) BB.01/HR.01.TT.04C RN-Transport durch Konvektion BB.01/HR.01.TT.05A Advektion (Gas) BB.01/HR.01.TT.05B Diffusion (Gas) HR.02.TT.01 C Diffusion (Lösung)

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		HR.02.TT.05 B Diffusion (Gas)
Rückhaltung	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TB.01 C Mikrobielle Kolloidbildung BB.01/HR.01.TB.01 D Biofilmbildung BB.01/HR.01.TB.01 G Mikrobielle Akkumulierung BB.01/HR.01/HR.02.TC.01 B Redoxprozesse BB.01/HR.01/HR.02.TC.01 E Kolloidbildung und -filtration BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 B/D Redoxprozesse BB.01/HR.01/HR.02.TT.02 A Physisorption (immobiler Phasen) BB.01/HR.01/HR.02.TT.02 B Oberflächenkomplexierung BB.01/HR.01/HR.02.TT.03 A Physisorption (mobile Phasen) BB.01/HR.01/HR.02.TT.03 E Chemosorption BB.01/HR.01/HR.02.TT.06 A Bildung von Eigenkolloiden BB.01/HR.01/HR.02.TT.06 B Bildung von Fremdkolloiden BB.01/HR.01/HR.02.TT.06 C Sorption an Kolloiden BB.01/HR.01/HR.02.TT.07 E Kolloidstabilität BB.01/HR.01/HR.02.TT.08 A Kolloidfiltration BB.01/HR.01/HR.02.TT.08 B Gas-/ Lösungsgrenzflächensorption
Diffusionskoeffizient	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TB.01 B Mikrobielle Komplexbildung BB.01/HR.01/HR.02.TC.01 A Speziation BB.01/HR.01/HR.02.TC.01 B Redoxprozesse

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 B/D Redoxprozesse BB.01/HR.01/HR.02.TH.05 A Diffusion der Dampfphase BB.01/HR.01/HR.02.TH.05 B Diffusion des gelösten Gases BB.01/HR.01/HR.02.TT.01 E Komplexbildung BB.01/HR.01/HR.02.TT.01 F Isotopische Verdünnung BB.01/HR.01/HR.02.TT.03 B Wechselwirkungen mit organischen Komplexbildnern
RN-Konzentration	BB.01/ HR.01/ HR.02	BB.01/HR.01/HR.02.TC.01 B Redoxprozesse BB.01/HR.01/HR.02.TC.01 D Ausfällung BB.01/HR.01/HR.02.TC.01 G Löslichkeit (RN und andere Spezies) BB.01/HR.01/HR.02.TC.02 B/D Redoxprozesse BB.01/HR.01.TH.03 B Infiltration, Abfluss BB.01/HR.01/HR.02.TH.04 C Immobilisierung der Porenwässer BB.01/HR.01/HR.02.TH.05 A Diffusion der Dampfphase BB.01/HR.01/HR.02.TH.05 B Diffusion des gelösten Gases HR.02.TH.07 C Dichte- und Viskositätsänderungen der Fluide BB.01/HR.01.TT.01 A Advektion (Lösung) BB.01/HR.01.TT.01 B Dispersion (Lösung) BB.01/HR.01/HR.02.TT.01 C Diffusion (Lösung) BB.01/HR.01/HR.02.TT.01 H Löslichkeit (RN und andere Spezies) BB.01/HR.01/HR.02.TT.02 D Ausfällung/ Auflösung (mit immobilisierten Phasen)

Primäre TUF	Komponente	Beitragende Prozesse
		BB.01/HR.01/HR.02.TT.03 D Ausfällung/ Auflösung BB.01/HR.01.TT.04 C RN-Transport durch Konvektion BB.01/HR.01.TT.05 A Advektion (Gas) BB.01/HR.01/HR.02.TT.05 B Diffusion (Gas) BB.01/HR.01/HR.02.TT.06 A Bildung von Eigenkolloiden BB.01/HR.01.TT.07 A Advektion (Kolloide) BB.01/HR.01.TT.07 B Dispersion (Kolloide) BB.01/HR.01/HR.02.TT.07 C Diffusion (Kolloide)
Tortuosität (Kanalisation)	BB.01/ HR.01	BB.01/HR.01.TC.02 C Mineralauflösung und -auslaugung
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 Thermische Zersetzung

Die TUF „Thermische Zersetzung“ berücksichtigt die Kristallwasserfreisetzung von Mineralen der Steinsalzformation und den damit verbundenen Integritätsverlust. Je nach mineralischer Zusammensetzung können unterschiedliche Temperaturabhängigkeiten gelten (Abb. 5.1). Es wird unterstellt, dass bei der Ausweisung eines ewG ein ausreichender Abstand zu Kalisalzen, Anhydrit/Gips und Tonmineralen eingehalten wird (siehe Kap. 2.3). Bei der nachfolgend verwendeten TUF wird daher davon ausgegangen, dass lediglich Polyhalit wesentlich zur Kristallwasserfreisetzung – welche nach /JOC 81/, /ROT 86/, /KUH 13/ oberhalb von 230 °C einsetzt – beiträgt. Unter der Annahme, dass die Freisetzung nicht sprunghaft bei 230 °C beginnt, wird folgende TUF vorgeschlagen, welche bereits ab etwa 200 °C geringe, aber exponentiell wachsende Kosten aufweist und oberhalb von 230 °C den maximalen (und konstanten) Funktionswert 1 annimmt:

$$k_{TZ}(\vartheta) = \begin{cases} \exp\left(\frac{\vartheta - 230 \text{ °C}}{5 \text{ °C}}\right), & 35 \text{ °C} \leq \vartheta < 230 \text{ °C} \\ 1, & \vartheta \geq 230 \text{ °C} \end{cases} \quad (5.1)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{TZ} [-]: TUF der thermischen Zersetzung

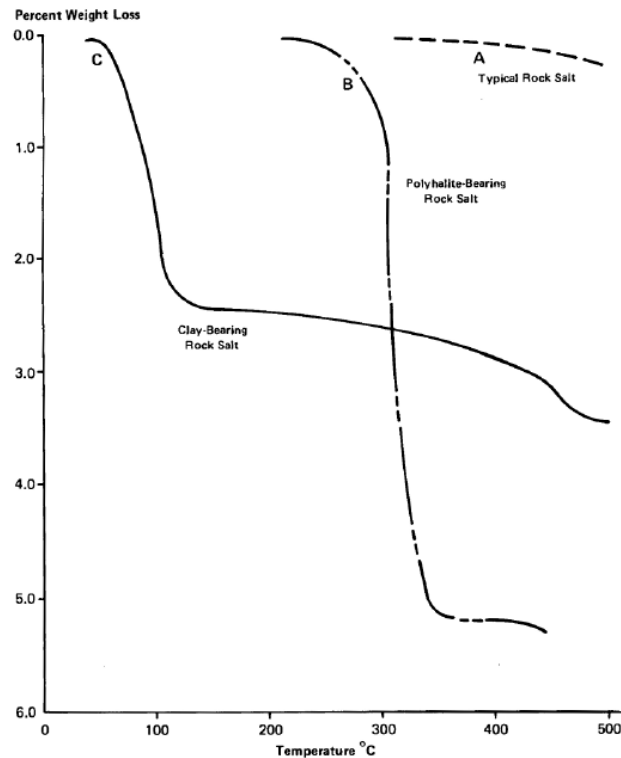


Abb. 5.1 Charakteristische Masseverlustkurven für Ton- und Polyhalit-haltige sowie -freie Salzsteine /KUH 13/

5.1.2 Mineralumwandlung

Aufgrund der lösungs- und 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 Standortspezifik ergänzt werden.

5.1.3 Kornbruch

Die TUF „Kornbruch“ berücksichtigt die Wasserfreisetzung durch Versagen von Salzkörnern aufgrund des temperaturbedingt steigenden Fluiddruckes innerhalb des Kornes sowie den damit einhergehenden Integritätsverlust. Die entsprechende Freisetzungstemperatur ist stark standortabhängig. Für die Herleitung der hier verwendeten TUF werden die experimentellen Ergebnisse aus /ROT 88/ für das steillagernde Staßfurt-Steinsalz des Salzbergwerks ASSE genutzt. Entsprechend wird eine mittlere Freisetzungstemperatur von 200 °C angenommen. Zur Berücksichtigung der Unsicherheit bei der Freisetzungstemperatur wird ein steigender Verlauf der TUF in der Nähe der Freisetzungstemperatur

temperatur angenommen. Dies wird durch die kumulierte Verteilungsfunktion der Normalverteilung mit Mittelwert 200 und Standardabweichung 20

$$k_{\text{FMK}}(\vartheta) = \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\vartheta - 200 \text{ °C}}{\sqrt{2} \cdot 20 \text{ °C}}\right)\right) / 2 \quad (5.2)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{FMK} [-]: TUF des Kornbruchs

erf: Gaußsche Fehlerfunktion

dargestellt.

5.1.4 Migration von Fluideinschlüssen

Die TUF „Migration von Fluideinschlüssen“ beschreibt die temperaturabhängige Bewegung von Fluideinschlüssen in Richtung der Wärmequelle, was bei höheren Temperaturen zu einer Vergrößerung der im Versatz und in der ALZ verfügbaren Lösungsmenge führen kann. Als Ansatz für die Beschreibung der Temperaturunverträglichkeit wird die Jenks Gleichung nach /OLA 84/ verwendet, sodass sich der Zusammenhang

$$k_{\text{FM}}(\vartheta) \approx 10^{0.00656 \frac{\vartheta}{\text{°C}} - 0.6036} \quad (5.3)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{FM} [-]: TUF der Migration von Fluideinschlüssen

ergibt.

5.1.5 Kompaktion (Kriechbeschleunigung)

Die TUF „Kompaktion (Kriechbeschleunigung)“ stellt die Temperaturabhängigkeit des Feuchtekriechens von Salzgrus dar. Dieser Prozess wird als wichtigste Einflussgröße für die Kompaktion betrachtet. Dabei wird davon ausgegangen, dass die zugehörigen Kriechraten mit zunehmender Temperatur steigen, solange Fluide auch in flüssiger Phase vorliegen und in das Steinsalz eindringen können. Die Erhöhung der Kriechrate mit der Temperatur erfolgt dementsprechend mit abnehmender Geschwindigkeit. Es wird ein exponentiell fallender Verlauf der TUF mit einem Wert von 20 % bei 100 °C angenommen. Dies führt zu dem Zusammenhang

$$k_{K,K}(\vartheta) = \exp\left(-\frac{\vartheta-35\text{ °C}}{100\text{ °C}-35\text{ °C}} \cdot \ln(5)\right). \quad (5.4)$$

ϑ [°C]: Temperatur

$k_{K,K}$ [-]: TUF der Kompaktion (Kriechbeschleunigung)

5.1.6 Kriechfähigkeit

Für die Temperaturabhängigkeit der Kriechfähigkeit von Steinsalz wird die Gleichung nach dem BGR(b)-Modell /HUN 94/ basierend auf einem Arrhenius-Gesetz verwendet. Darin verhalten sich die Kriechraten entsprechend

$$\dot{\varepsilon}(\vartheta) \approx 2.3 \cdot 10^{-4} \exp\left(\frac{-42 \cdot 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot (\vartheta + 273\text{ °C})}\right) + 2.1 \cdot 10^6 \exp\left(\frac{-113.4 \cdot 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot (\vartheta + 273\text{ °C})}\right). \quad (5.5)$$

ϑ [°C]: Temperatur

$\dot{\varepsilon}$ [-]: Kriechrate

$R = 8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$: universelle Gaskonstante

5.1.7 Lösungsdruck

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

$$\frac{p(\vartheta)}{\text{MPa}} = -1,22469 \cdot 10^{-5} \left(\frac{\vartheta}{\text{°C}}\right)^3 + 0,00786794 \left(\frac{\vartheta}{\text{°C}}\right)^2 + 0,475555206 \frac{\vartheta}{\text{°C}} - 13,3122172. \quad (5-6)$$

ϑ [°C]: Temperatur

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

5.1.8 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:

$$p \approx (\vartheta + 273^{\circ}\text{C}). \quad (5.7)$$

ϑ [°C]: Temperatur

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

5.1.9 Behälterabsinken

Ein Absinken von Endlagerbehältern kann aufgrund der höheren mittleren Dichte der Behälter gegenüber dem Steinsalz und der Kriecheigenschaften des Salzes erfolgen und damit zu einer reduzierten effektiven Barrieremächtigkeit führen. Unter konservativen Annahmen wie bei /TOU 23/ kann sich die Absinkrate bei einer Temperaturerhöhung von 100°C auf 150°C um den Faktor 10 erhöhen. Es wird ein exponentieller Zusammenhang der Form

$$k_{\text{BA}}(\vartheta) \approx \exp\left(\frac{\vartheta - 250^{\circ}\text{C}}{30^{\circ}\text{C}}\right) \quad (5.8)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{BA} [-]: TUF des Behälterabsinkens

für das Behälterabsinken angenommen.

5.1.10 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. 5.2), woraus sich eine Aktivierungsenergie $E_A = 32 \cdot 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$ (Anstieg der „Best-Fit Line“ in Abb. 5.2) ergibt. Es folgt also für die TUF der Zusammenhang

$$k_{\text{Korr}}(\vartheta) \approx \exp\left(\frac{-32 \cdot 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot (\vartheta + 273 \text{ °C})}\right) \quad (5.9)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{Korr} [-]: TUF der Korrosionsrate

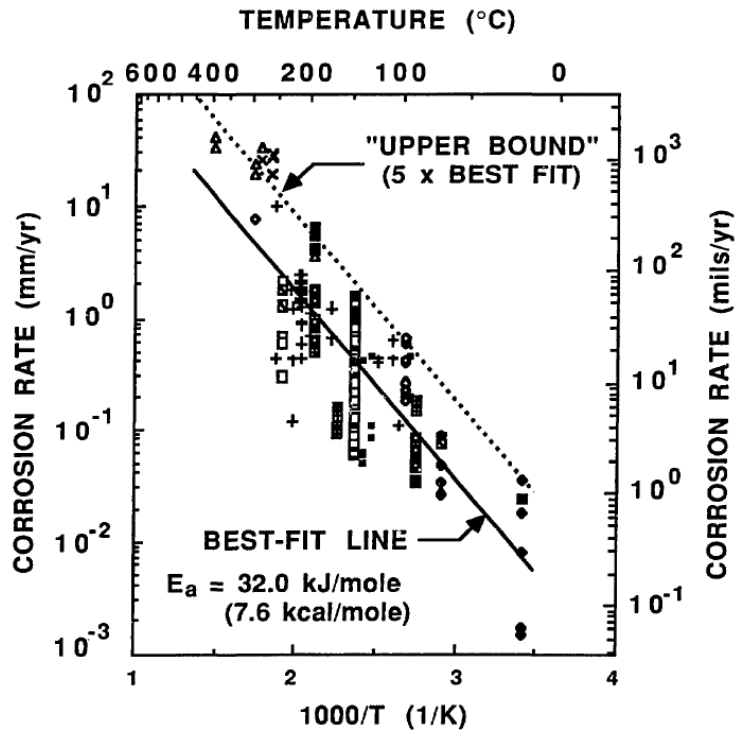


Abb. 5.2 Daten zur Temperaturabhängigkeit der Korrosionsraten für unlegierten Stahl in Salzlösung mit Arrhenius-Fit aus /DIE 88/.

5.1.11 Korrosionsrate durch H₂S

Die TUF „Korrosionsrate durch H₂S“ ergibt sich aus Daten zur temperaturabhängigen Korrosion durch H₂S in /QI 14/ und /GAO 17/. Aus /QI 14/, Fig. 1 wurden Messwerte für die Korrosion eines Stahls in H₂S-gesättigter 5 %-iger NaCl-Lösung bei 40 °C, 60 °C und 90 °C berücksichtigt und aus /GAO 17/, Fig. 1 Messwerte für die Korrosion eines Karbonstahls, der sich für jeweils vier Tage in 0,00385-molarer H₂S-Lösung bei Temperaturen zwischen 80 °C und 200 °C befand. Aus diesen Werten wurde für den Verlauf der TUF geschlossen, dass sich die Korrosionsrate zwischen 35 °C und 60 °C auf 1/3 des Anfangswertes, bis 90 °C auf 1/4 des Anfangswertes, zwischen 90°C und 160 °C nochmals um die Hälfte reduziert und zwischen 160 °C und 200 °C kaum noch eine Änderung

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

$$k_{\text{KorrH}_2\text{S}}(\vartheta) \approx 94,428 \left(\frac{\vartheta}{^\circ\text{C}} \right)^{-1,321} . \quad (5.10)$$

ϑ [°C]: Temperatur

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

5.1.12 Versprödungsrate

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

5.1.13 Mikrobielle Aktivität

Ausschließlich halophile Mikroben, die an die hohe Salinität angepasst sind, können langfristig in einer Salzformation überleben. Mikrobielle Prozesse sind generell bei niedrigeren Temperaturen begünstigt. /MCG 00/ konnte in Sole aus einem Kalflöz das 80 °C erfahren hatte, keine Hinweise auf mikrobielle Aktivität finden, obwohl die Bedingungen ansonsten für eine Aktivität gegeben waren. Daher wird hier postuliert, dass eine TUF für mikrobielle Aktivität in Salzformationen oberhalb von 80 °C den Wert 0 annehmen muss. Unterhalb dieser kritischen Temperatur ist bekannt, dass die höchste in bisherigen Untersuchungen festgestellte, von anaeroben Haloarchaeen noch tolerierbare Temperatur bei 66°C liegt /KIM 18/. Daher wird für diese Temperatur ein mittlerer Wert der TUF von 0,5 angenommen. Für niedrigere Temperaturen steigt die TUF und nimmt bei Gebirgstemperatur den Wert 1 an. Bei Temperaturen oberhalb von 66 °C fällt die TUF in gleicher Weise. Die Übergangsbereiche der TUF werden jeweils durch ein Polynom 4. Ordnung beschrieben, sodass sich insgesamt der Zusammenhang

$$k_{\text{MA}}(\vartheta) = \begin{cases} 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\vartheta - 35^\circ\text{C}}{66^\circ\text{C} - 35^\circ\text{C}} \right)^4, & 35^\circ\text{C} \leq \vartheta < 66^\circ\text{C} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\vartheta - 80^\circ\text{C}}{66^\circ\text{C} - 80^\circ\text{C}} \right)^4, & 66^\circ\text{C} \leq \vartheta < 80^\circ\text{C} \\ 0, & 80^\circ\text{C} \leq \vartheta \leq 250^\circ\text{C} \end{cases} \quad (5.11)$$

ϑ [°C]: Temperatur

k_{MA} [-]: TUF der mikrobiellen Aktivität

ergibt.

5.1.14 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

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

ϑ [°C]: Temperatur

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

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

5.1.15 Viskosität

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

$$\eta_{\text{Lös}}(\vartheta) = \eta_{\text{W}}(\vartheta) \cdot \left(1 + am + bm^2 + cm^3 + d\vartheta(1 - \exp(km))\right) \quad (5.13)$$

ϑ [°C]: Temperatur

η_{W} [cP]: Viskosität von Wasser

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

$a = 0,0816$: empirischer Parameter

$b = 0,0122$: empirischer Parameter

$c = 0,000128$: empirischer Parameter

$d = 0,000629$: empirischer Parameter

$k = -0,7$: empirischer Parameter

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

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

$$\eta_W(\vartheta) = 0,0204 \text{ cP} \left(\frac{\vartheta}{^\circ\text{C}} \right)^{-0.942} \quad (5.14)$$

ϑ [°C]: Temperatur

η_W [cP]: Viskosität von Wasser

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

$$\eta_{\text{Gas}}(\vartheta) \propto \sqrt{\vartheta + 273^\circ\text{C}} \quad (5.15)$$

ϑ [°C]: Temperatur

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

angenommen.

5.1.16 Dichte

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

$$x(\vartheta) = c_1 \cdot \exp(a_1 m) + c_2 \cdot \exp(a_2 \vartheta) + c_3 \cdot \exp(a_3 p), \quad (5.16)$$

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

ϑ [°C]: Temperatur

x [-]: empirische Funktion

ρ [g/cm³]: Dichte von NaCl-Lösung

$c_1 = -9,9595$: empirischer Parameter

$c_2 = 7,0845$: empirischer Parameter

$c_3 = 3,9093$: empirischer Parameter

$a_1 = -0,004539$: empirischer Parameter

$a_2 = -0,0001638$: empirischer Parameter

$a_3 = 0,00002551$: empirischer Parameter

$A = -3,033405$: empirischer Parameter

$B = 10,128163$: empirischer Parameter

$C = -8,750567$: empirischer Parameter

$D = 2,661307$: empirischer Parameter

$p = 70$: Druck [bar]

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

verwendet.

5.1.17 Rückhaltung

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

5.1.18 Diffusionskoeffizient

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

$$D_{\text{Lös}}(\vartheta) \propto \frac{\vartheta + 273^{\circ}\text{C}}{\eta_{\text{Lös}}(\vartheta)}, \quad (5.17)$$

ϑ [°C]: Temperatur

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

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

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

$$D_{\text{Gas}}(\vartheta) \propto \frac{(\vartheta + 273^{\circ}\text{C})^{\frac{3}{2}}}{p(\vartheta)} \propto \sqrt{\vartheta + 273^{\circ}\text{C}} \quad (5.18)$$

ϑ [°C]: Temperatur

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

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

verwendet.

5.1.19 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.

5.1.20 Tortuosität (Kanalisierung)

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

5.1.21 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.

5.1.22 Bewertung des Wissenstandes zu den primären TUF

Die Bewertung der primären TUF für das Wirtsgestein Steinsalz hinsichtlich der Verfügbarkeit einer mathematischen Beschreibung der TUF, 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.

Tab. 5.2 Bewertung der primären TUF für das Wirtsgestein Steinsalz

Primäre TUF	Beschreibung verfügbar	Beschreibung oder Auftreten Standort- / ELK*-abhängig	Expertenmeinung verwendet	Forschungsbedarf
<i>integritätsrelevante TUF</i>				
Thermische Zersetzung	ja	ja / ja	ja	nein
Mineralumwandlung	nein	ja / ja	nein	ja
Kornbruch	ja	ja / ja	ja	nein
Migration von Fluideinschlüssen	ja	nein / nein	nein	nein

Primäre TUF	Beschreibung verfügbar	Beschreibung oder Auftreten Standort- / ELK*-abhängig	Expertenmeinung verwendet	Forschungsbedarf
Kompaktion (Kriechbeschleunigung)	ja	ja / nein	ja	ja
Kriechfähigkeit	ja	ja / nein	ja	ja
Behälterabsinken	ja	ja / nein	ja	ja
Lösungsdruck	ja	nein / nein	nein	nein
Gasdruck	ja	nein / nein	nein	nein
Korrosionsrate	ja	ja / nein	nein	nein
Korrosionsrate durch H ₂ S	ja	ja / nein	nein	nein
Versprödungsrate	nein	ja / nein	nein	ja
Mikrobielle Aktivität	ja	ja / ja	ja	nein
Thermochemische Sulfatreduktion	ja	nein / ja	nein	nein
<i>RN-transport-relevante TUF</i>				
Viskosität	ja	nein / nein	nein	nein
Dichte	ja	nein / nein	nein	nein
Rückhaltung	nein	ja / nein	nein	ja
Diffusionskoeffizient	ja	nein / nein	nein	nein
RN-Konzentration	nein	ja / nein	nein	nein
Tortuosität (Kanalisierung)	nein	nein / nein	nein	ja
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 während 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 in diesem Kapitel 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 den anderen ähnlichen Größen 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 vereinfachenden Ansatz und einer bilanzierenden Modellierung der Nahfeldentwicklung während des Temperaturimpulses in einem Endlager her.

Tab. 5.3 Identifizierte Bilanzierungsgrößen mit den beitragenden primären TUF

Bilanzierungsgröße	Beeinflusste Komponente	Beitragende primäre TUF
Porosität	BB.01/ HR.01/ HR.02	Thermische Zersetzung, Mineralumwandlung, Kornbruch, Migration von Fluideinschlüssen, Kompaktion (Wärmedehnung) (nur BB.01/ HR.01), Kompaktion (Kriechbeschleunigung) (nur BB.01/ HR.01), Kriechfähigkeit (nur HR.02)
Lösungsmenge	WP.00/ BB.01/ HR.01/ HR.02	Thermische Zersetzung, Kornbruch, Migration von Fluideinschlüssen, Mineralumwandlung, Mikrobielle Aktivität, Korrosionsrate (nur BB.01/ HR.01)
Gasmenge	BB.01/ HR.01/ HR.02	Mikrobielle Aktivität, Thermochemische Sulfatreduktion, Korrosionsrate (nur BB.01/ HR.01)
H ₂ S-Menge	WP.00/ BB.01/ HR.01/ HR.02	Mikrobielle Aktivität, Thermochemische Sulfatreduktion

Die Ableitung der Bilanzierungsgröße „Lösungsmenge“ wird durch den initialen Wassergehalt sowie produzierende und verbrauchende Prozesse bestimmt. Der initiale Wassergehalt eines Salzgesteins besteht aus dem intergranularen Wasser, dem Wasser in Fluideinschlüssen und dem Hydratwasser von Nebenmineralen der Paragenese /CUE 95/, /KUH 13/. Nach /KUH 13/ beträgt der Wassergehalt i.d.R. bis zu 0,03 Volumen-% für steillagerndes Steinsalz und bis zu 1,03 Volumen-% (für einzelne Proben bis zu 9,5 Volumen-%) für flachlagerndes Steinsalz. Dabei wird in /ROE 84/ dem intergranularen Wasser ein Anteil bis zu 50 % des gesamten Wassergehaltes in einer Salzformation bescheinigt. In /CUE 95/ wurden durchschnittliche Wassergehalte von 0,53 Volumen-% (für einzelne Proben bis zu 3,2 Volumen-%) für vier flachlagernde spanische Steinsalze und von 1,04 Volumen-% (für einzelne Proben bis zu 6 Volumen-%) für ein steillagerndes spanisches Steinsalz angegeben. /CUE 95/ quantifiziert die durchschnittlichen Beiträge des intergranularen und des eingeschlossenen Wassers der fünf Steinsalze auf jeweils 0,21 und 0,16 Volumen-%, während für das Hydratwasser ein Anteil von durchschnittlich 0,26 Volumen-% für zwei flachlagernde Steinsalze und von 0,87 Volumen-% für steillagerndes Steinsalz bestimmt wurde. Demnach kann von einem nicht vernachlässigbaren initialen Gehalt an frei verfügbarem, intergranularem Wasser im

Nahfeld eines Endlagers im Steinsalz ausgegangen werden, welches die initiale Lösungsmenge (n_{init}) im vorliegenden Ansatz darstellt.

Die initiale Lösungsmenge kann mit steigender Temperatur durch die produzierenden Prozesse, die durch die primären TUF „Thermische Zersetzung“ (Kap. 5.1.1, Gleichung (1)), „Kornbruch“ (Kap. 5.1.3, Gleichung (3)) und „Migration von Fluideinschlüssen“ (Kap. 5.1.4 Gleichungen (3)) abgebildet werden und das eingeschlossene Wasser und das Hydratwasser aus hydratisierten Mineralen wie Polyhalit ($\text{K}_2\text{Ca}_2\text{Mg}(\text{SO}_4)_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) in den intergranularen Porenraum freisetzen /CUE 95/, /KUH 13/, vergrößert werden. In Abb. 5.3 (links) sind die entsprechenden TUF zu diesen Prozessen gemäß der vorgegebenen Gleichungen dargestellt. Diese primären TUF werden zur Ableitung der Bilanzierungsgröße „Lösungsmenge“ mit dem maximal möglichen Beitrag des zugeordneten Prozesses multipliziert. Zum Beispiel kann anhand der vorgehend diskutierten In-situ-Daten /CUE 95/, /KUH 13/ – mangels einer Vorgabe für deutsche Standorte im Steinsalz – in diesem Vorhaben eine Annahme getroffen werden, dass der maximale Wassergehalt der relevanten Salzformationen bei 1 Volumen-% liegt und sich aus dem intergranularen, eingeschlossenen und Hydratwasser zu jeweils maximal 0,2, 0,2 und 0,6 Volumen-% zusammensetzt.

So ergibt sich aus den Beiträgen der Lösungsmenge in Versatz und ALZ (Abb. 5.3, links) die Lösungsmenge im Versatz und ALZ in Abb. 5.3, rechts: Die Lösungsmenge im Nahfeld kann demnach vom initialen Wert $n_{\text{init}} = 0,2$ Volumen-% aufgrund der produzierenden Prozesse um das Fünffache auf $n_{\text{max}} = 1$ Volumen-% zunehmen. Dies wird im vorliegenden Ansatz durch die Multiplikation der TUF „Kornbruch“, „Migration von Fluideinschlüssen“ und „Thermische Zersetzung“ mit jeweiligen maximalen Beiträgen von 0,2, 0,2 und 0,6 Volumen-% abgebildet (Abb. 5.3), wobei für die durch die beiden ersteren TUF abgebildeten Prozesse mangels genauerer Informationen gleiche Effektivität bei der Freisetzung des eingeschlossenen Wassers angenommen wird.

Die Prozesse, die durch die primären TUF „Mineralumwandlung“ und „Mikrobielle Aktivität“ abgebildet werden (Tab. 5.1 Primäre TUF für das Wirtsgestein Steinsalz), können zur Änderung der Lösungsmenge ebenfalls beitragen, z. B. durch Wasserverbrauch bei der Mineralumwandlung von Anhydrit zu Gips, wobei das Vorzeichen und die Größenordnung ihrer Beiträge von der mineralogischen Zusammensetzung, den chemischen Verhältnissen und der Zusammensetzung der mikrobiellen Population abhängt. Aufgrund dieses Umstandes kann ihre Berücksichtigung in der Bilanzierungsgröße „Lösungsmenge“ zu dem Zeitpunkt noch nicht erfolgen. Für mikrobielle Aktivität kann

allerdings festgehalten werden, dass sie bei Temperaturen oberhalb von 80 °C nicht stattfindet /MCG 00/ und damit keinen Beitrag zur Lösungsmenge leistet. Weitere Details zu Beiträgen dieser primären TUF können durch eine bilanzierende Modellierung gewonnen werden.

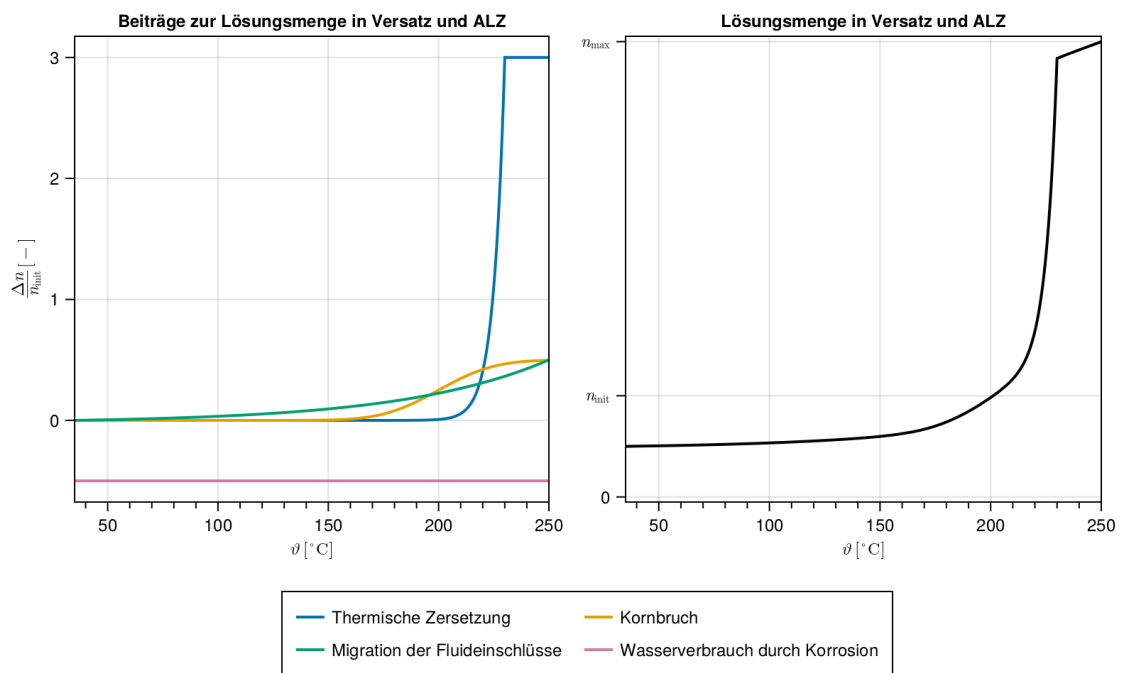


Abb. 5.3 Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Lösungsmenge (links) und resultierende Lösungsmenge (rechts) im Versatz und in der ALZ.

Der Prozess „Korrosion“ verbraucht das Wasser, welches in Kontakt mit dem Behälter kommt, mit einer Rate, die hier durch die primäre TUF „Korrosionsrate“ abgebildet wird. Für die betrachtete Bilanzierungsgröße „Lösungsmenge“ kann angenommen werden, dass aufgrund des In-situ-Fluiddruckes auch während des Temperaturimpulses zumindest ein Teil der im Versatz und in der ALZ verfügbaren Porenlösung in die unmittelbare Nähe des Behälters transportiert und im Korrosionsprozess verbraucht wird. Dies wird in Abb. 5.3 dargestellt durch die TUF „Wasserverbrauch durch Korrosion“, die unterhalb des neutralen Beitrages „0“ liegt. Es wird vereinfachend ein konstanter Beitrag angenommen, der bei jeder Temperatur erfolgt, da der Verbrauch nicht nur von der Lösungsverfügbarkeit, sondern auch von der Lokation der Lösung (Behälternähe) abhängt. Dementsprechend wirkt auf die Komponente „Behälter“ potenziell die gesamte im Versatz und in der ALZ initial verfügbare und durch die vorangehend diskutierten primären TUF („Kornbruch“, „Migration von Fluideinschlüssen“, „Thermische Zersetzung“,

„Mineralumwandlung“ und „Mikrobielle Aktivität“) produzierte Lösungsmenge. Der Wasserverbrauch durch Korrosion wird folglich am Behälter für die Bilanzierung der Lösungsmenge nicht berücksichtigt (Abb. 5.4).

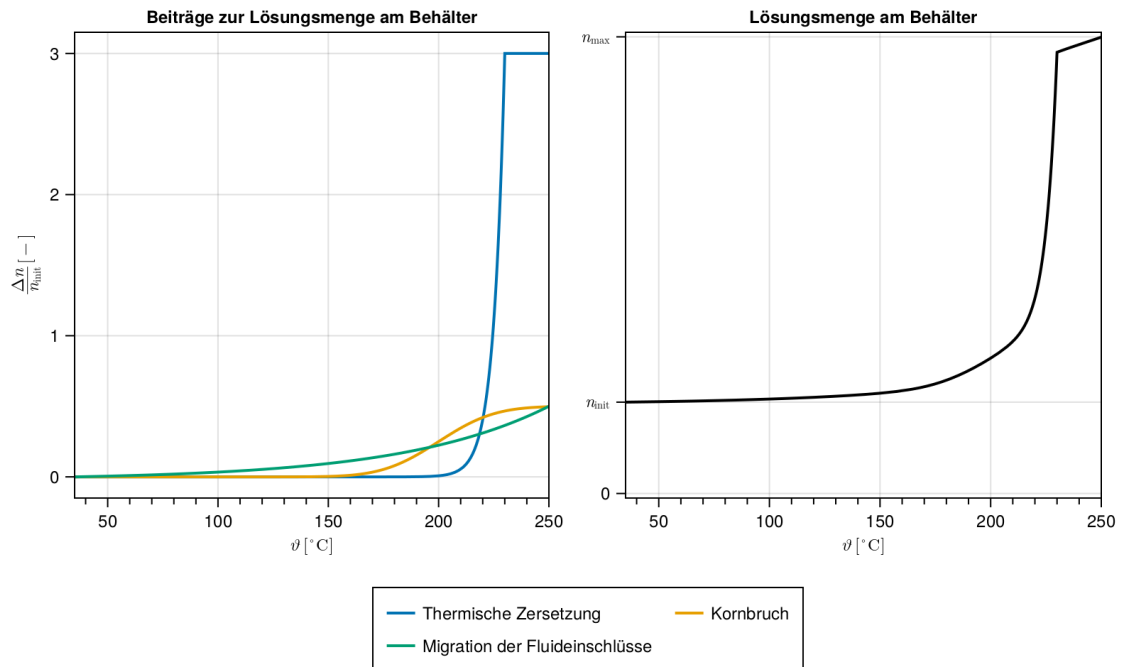


Abb. 5.4 Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Lösungsmenge (links) und resultierende Lösungsmenge (rechts) am Behälter

Im Projekt VSG wurde im Sicherheitskonzept für Standort Gorleben gefordert, dass die in das Endlager abfallnah eingebrachte Feuchtigkeit zu minimieren ist. Ziel dieser Maßnahme ist es, die Korrosion der Abfallbehälter und damit die Gasbildung und den Gasdruckaufbau im Endlager zu begrenzen /MOE 12/. Ob dieses Konzept für Salzformationen in der aktuellen Phase der Standortsuche vorausgesetzt werden kann, ist noch zu prüfen. Allerdings kann überschlagen werden, dass bei dem oben angenommenen maximalen Wassergehalt von 1 Volumen-% der Zufluss des Wassers aus einer Salzschieht mit einer Dicke von ca. 10 m um den POLLUX-Behälter ausreichen würde, um den Abschirmbehälter mit einer Wanddicke von 270 mm zu korrodieren. Diese Salzschiehtdicke reduziert sich auf 6 m für die Korrosion der äußeren Abschirmbehälterschicht mit einer Dicke von 90 mm. Bei Querabmessungen der Einlagerungsstrecke von ca. 3 m × 5 m und vergleichbarer Mächtigkeit der ALZ erscheinen die Salzschiehtdicken von 6 bis 10 m als „Lösungseinzugsgebiete“ für Behälter in erster Näherung als realistisch. Zum einen verdeutlicht diese Überschlagsrechnung, dass solche Wassergehalte im Steinsalz die Behälterintegrität stark gefährden können. Zum anderen deutet sie an, dass aufgrund

der Korrosion das Wasserdefizit im gesamten Versatz im Einlagerungsbereich und in der anliegenden ALZ sogar bei den relativ hohen angenommenen Wassergehalten herrschen kann.

Es bleibt die Frage zu beantworten, ob die Massenbilanz dieser Übersichtsrechnung bei den erwarteten Korrosionsraten innerhalb des Temperaturimpulses realisierbar ist. Unter Annahme der in /DIE 88/ und /KIE 17/ veröffentlichten Korrosionsraten, die im vorgehenden Unterkapitel zur Herleitung der TUF „Korrosionsrate“ (Gleichung (9)) verwendet wurden und die Bedingungen in einem Endlager wiedergeben, würden für die Korrosion der äußeren Abschirmbehälterschicht mit einer Dicke von 90 mm bei Gebirgstemperatur (die Korrosionsrate von ca. 0,02 mm/Jahr), ca. 5000 Jahre ausreichen. Diese Zeit liegt innerhalb der Zeitdauer des Temperaturimpulses, so dass von einem Wasserdefizit im gesamten betrachteten Temperaturbereich ausgegangen werden kann. Dieses Wasser steht allerdings anderen im Versatz und in der ALZ ablaufenden Prozessen, wie z. B. Kompaktion (Kriechbeschleunigung) oder Kriechfähigkeit, während der Migration zum Behälter zur Verfügung. Daher wird hier der Anteil der verfügbaren Lösungsmenge im Versatz und in der ALZ als nicht vernachlässigbar eingeschätzt und – mangels genauerer Erkenntnisse – im gesamten Temperaturbereich willkürlich um 50 % der initialen Lösungsmenge reduziert (Abb. 5.3). Für eine begründete Quantifizierung des Lösungsverbrauchs durch Korrosion bedarf es einer entsprechenden bilanzierenden Modellierung mit Berücksichtigung des Lösungstransportes zum Behälter.

Anhand der oben für die Bilanzierungsgröße „Lösungsmenge“ diskutierten Beitrages des intergranularen Wassers von 0,2 Volumen-% im Steinsalz kann für die Bilanzierungsgröße „Porosität“ unter der Annahme, dass das Gasphasenvolumen im unverritzten Steinsalz (ewG) vernachlässigt werden kann, der Anfangswert von 0,2 Volumen-% angenommen werden. Für die ALZ und Versatz kann anhand der Ergebnisse von /WIE 10/ und /OLI 03/ ein Anfangswert von jeweils 0,5 und 30 Volumen-% angenommen werden. Der maximale Beitrag der primären TUF „Kornbruch“, „Migration von Fluideinschlüssen“ und „Thermische Zersetzung“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ kann entsprechend der oben diskutierten Wasserfreisetzungen auf eine Erhöhung um jeweils 0,1, 0,1 und 0,6 Volumen-% für Versatz, ALZ und ewG quantifiziert werden. Da ferner die primäre TUF „Kompaktion (Wärmedehnung)“ sowohl die temperaturbedingte Expansion der Salzkristalle während der Erhitzung als auch die Kontraktion dieser Salzkristalle während der Abkühlung dieser Komponenten beschreibt, kann der integrale Einfluss dieser TUF innerhalb des Temperaturimpulses auf die Porosität als vernachlässigbar angenommen

werden, weil das ein vollkommen reversibler Prozess ist. Anhand der Ergebnisse von /WIE 10/ führt das Kriechen des Steinsalzes zum vollständigen Schließen der ALZ, d.h. zur Herstellung des Anfangswertes für unverritztes Steinsalz, innerhalb von einigen Tausend Jahren. Dementsprechend findet für die maximale Ausprägung der primären TUF „Kompaktion (Kriechbeschleunigung)“ eine Reduktion der Bilanzierungsgröße „Porosität“ in der ALZ auf einen minimalen Wert von 0,2 Volumen-%. Auf ähnliche Weise reduziert die primäre TUF „Kompaktion (Kriechbeschleunigung)“ die Bilanzierungsgröße „Porosität“ im Versatz anhand der Ergebnisse von /MÜL 12/ auf einen Endwert von 1 Volumen-%. Aus dem gleichen Grund wie für die Bilanzierungsgröße „Lösungsmenge“, kann die Berücksichtigung des Beitrages der primären TUF „Mineralumwandlung“ zur Bilanzierungsgröße „Porosität“ zu diesem Zeitpunkt noch nicht erfolgen. Die Bilanzierung der Porosität für Versatz bzw. ALZ sind in Abb. 5.5 bzw. Abb. 5.6 dargestellt.

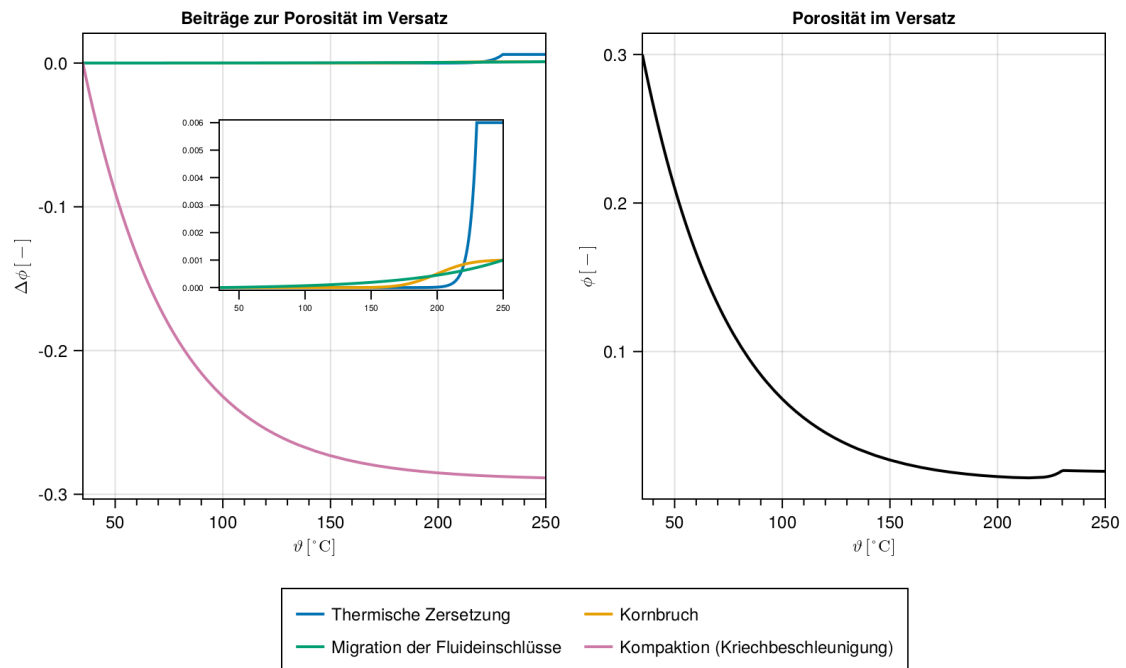


Abb. 5.5 Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) im Versatz

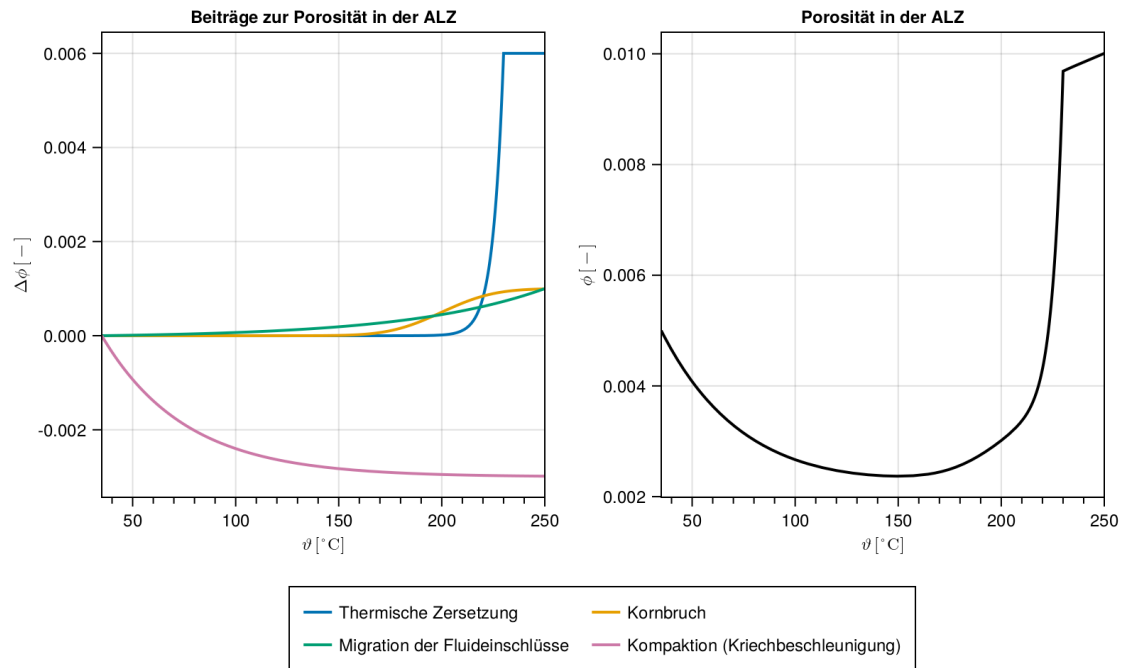


Abb. 5.6 Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) in der ALZ

Die initiale Gasmenge in den jeweiligen Komponenten ergibt sich demnach als Wert der Differenz zwischen den Bilanzierungsgrößen „Porosität“ und „Lösungsmenge“. Die Menge von H_2 -Gas, welches aus dem Wasserverbrauch bei der Korrosion gebildet wird, kann entsprechend der obigen Diskussion zur Korrosion aus dem Verhältnis der molaren Volumina des Produktes Gas und des Eduktes Wasser multipliziert mit dem Ausgangswert von 0,1 Volumen-% für intergranulare Lösung abgeleitet und innerhalb des Temperaturimpulses als konstant angenommen werden. Dies ist darin begründet, dass zwar stetig H_2 gebildet wird, hier jedoch nicht der zeitliche Verlauf dieser Bildung betrachtet wird.

Weitere Beiträge zur Gasmenge liefern die primären TUF „Mikrobielle Aktivität“ und „Thermochemische Sulfatreduktion“. Aerobe Bakterien können innerhalb von einigen Monaten bzw. Jahren den Sauerstoff, welcher 22 % des Gasvolumens im Versatz und der ALZ beiträgt, im ELS verbrauchen /PUI 01/. Der Beitrag von weiteren mikrobiellen Spezies unter den dann herrschenden anaeroben Verhältnissen zur Gasmenge hängt wesentlich vom Angebot an organischen Stoffen und Wasser sowie von der Zusammensetzung der mikrobiellen Population ab und kann zum jetzigen Zeitpunkt nicht quantifiziert werden. Für die Temperaturen oberhalb von 80°C leistet mikrobielle Aktivität wie oben diskutiert keinen Beitrag zur Gasmenge. Aufgrund der bei den Randbedingungen

vorausgesetzten vernachlässigbaren Relevanz der Einwirkungen von Anhydrit/Gips kann der Beitrag der thermochemischen Sulfatreduktion zur Gasmenge (jedoch nicht zur H₂S-Menge) im Vergleich zu anderen Beiträgen als vernachlässigbar eingeschätzt werden. Dementsprechend kann im vorliegenden Ansatz von einer konstanten Gasmenge in den betrachteten Komponenten innerhalb des Temperaturimpulses ausgegangen werden, solange kein Gastransport aus dem ELS stattfindet. Es ist jedoch eine der Randbedingungen dieser Analyse, dass das Gas über den Versatz, die ALZ und Verschluss-system aus dem ELS abfließen kann.

Für die Bilanzierungsgröße „H₂S-Menge“ wird angenommen, dass durch thermochemische Sulfatreduktion und mikrobielle Gasbildung gleichermaßen H₂S produziert wird und für die Behälterkorrosion zur Verfügung steht (Abb. 5.7). Der Beitrag der thermochemischen Sulfatreduktion ergibt sich aus der TUF „Thermochemische Sulfatreduktion“. Für die mikrobielle Gasbildung wird ausgehend von der TUF „Mikrobielle Aktivität“ in Gleichung (11) die Funktion „Mikrobielle Gasbildung“

$$n_{MG}(\vartheta) = \Delta n_{\max} \cdot (k_{MA}(\vartheta) \cdot 0,8 + 0,2) \quad (5.19)$$

betrachtet. Die Funktion entspricht dem qualitativen Verlauf der TUF „Mikrobielle Aktivität“, wobei oberhalb von 80 °C als minimaler Funktionswert konstant 20 % des maximalen Stoffmengenbeitrages zur H₂S-Menge angenommen wird. Mit dieser Annahme wird berücksichtigt, dass unabhängig von der maximalen Temperatur in der Phase des Temperaturanstieges bereits H₂S produziert wird.

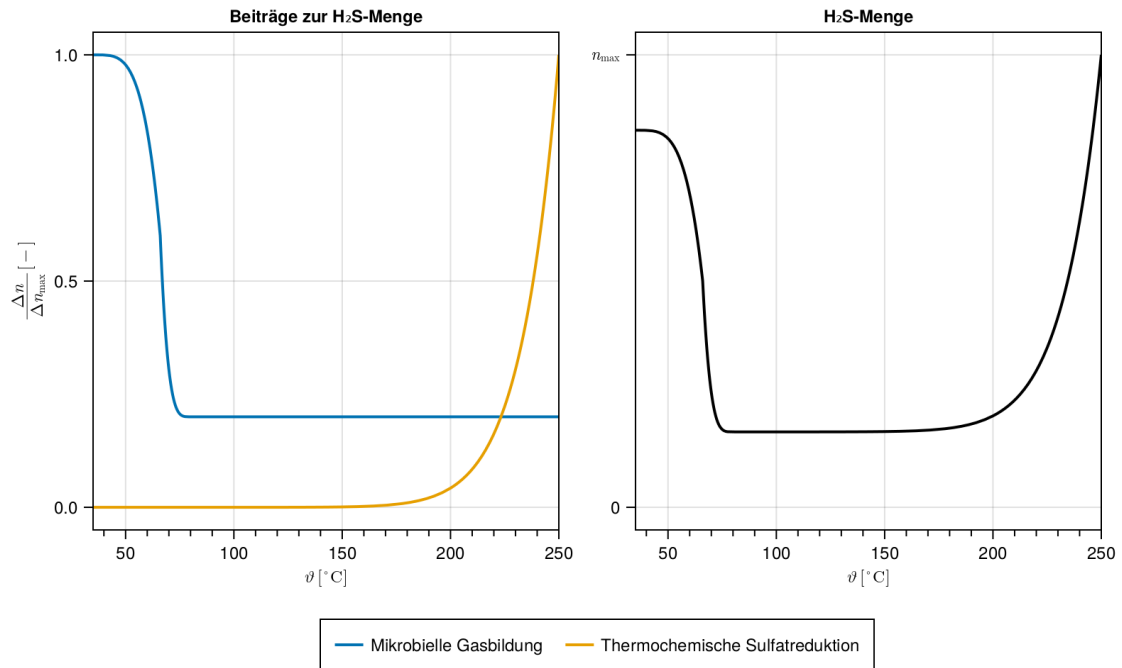


Abb. 5.7 Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur H₂S-Menge (links) und resultierende H₂S-Menge (rechts).

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). 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 erachteten 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, ohne dass eine quantitative Bewertung suggeriert

wird. Auf diese Weise fließen die Prozesse allerdings als gleichwertig in die Betrachtung ein. In einem nächsten Schritt ist daher eine Wichtung der Prozesse vorzunehmen.

Die Art der Ableitung aus primären TUF und Bilanzierungsgrößen wird in der folgenden Tabelle Tab. 5.4 zusammengefasst und die resultierenden abgeleiteten TUF werden in den nachfolgenden Unterabschnitten (Kap. 5.3.1 bis 5.3.14) in Abbildungen dargestellt.

Tab. 5.4 Abgeleitete TUF für das Wirtsgestein Steinsalz

Abgeleitete TUF	Komponente	Art der Ableitung aus primären TUF und Bilanzierungsgrößen
Mikrobiell beeinflusste Korrosion	WP.00	Multiplikation von „Korrosionsrate“, „Mikrobielle Aktivität“ und „Lösungsmenge“
Korrosion	WP.00	Multiplikation von „Korrosionsrate“ mit „Lösungsmenge“
Korrosion durch H ₂ S	WP.00	Multiplikation von „Korrosionsrate durch H ₂ S“ mit „H ₂ S-Menge“
Lösungsdruckänderung	BB.01/ HR.01	Multiplikation von „Lösungsdruck“ mit „Lösungsmenge“
Gasdruckänderung	BB.01/ HR.01	Multiplikation von „Gasdruck“ mit „Gasmenge“
Kompaktion (Kriechbeschleunigung)	BB.01/ HR.01	„Kompaktion (Kriechbeschleunigung)“
Kriechfähigkeit (Steinsalz)	HR.02	„Kriechfähigkeit“
Kornbruch	HR.02	„Kornbruch“
Behälterabsinken	BB.01/ HR.01/ HR.02	„Behälterabsinken“
Advektion / Dispersion (Lösung)	BB.01/ HR.01	Multiplikation von Durchlässigkeitsbeiwert („Permeabilität“ * „Dichte“ / „Viskosität“) mit „Lösungsdruck“ und „Lösungsmenge“

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

Die Entscheidung über die Notwendigkeit der Ableitung der TUF aus den primären integritätsrelevanten TUF „Korrosionsrate“, „Mikrobielle Aktivität“, „Lösungsdruck“, „Gasdruck“ oder „Korrosionsrate durch H₂S“ durch Multiplikation mit Bilanzierungsgrößen „Lösungsmenge“, „Gasmenge“ bzw. „H₂S-Menge“ begründete sich mit dem Argument, dass diese primäre TUF nur dann eine Wirkung entfalten können, wenn der bzw. das durch die entsprechende Bilanzierungsgröße abgebildete Wirkstoff bzw. -medium zur Verfügung steht. Z. B. können die durch die abgeleitete TUF „Korrosion“ abgebildeten anaeroben Korrosionsprozesse nur stattfinden, wenn das an der anaeroben Korrosionsreaktion beteiligte Edukt Wasser zur Verfügung steht. Auf ähnliche Weise kann eine „Gasdruckänderung“ (abgeleitete TUF) aus der „Gasdruck“-Temperaturabhängigkeit (primäre TUF) nur beim Vorliegen des Mediums Gas (Bilanzierungsgröße „Gasmenge“) abgeleitet 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. Im Fall der Diffusion findet auch die Bilanzierungsgröße „Porosität“ Einzug in den Diffusionsterm der Transportgleichung über den effektiven Diffusionskoeffizienten, der durch die Hinzunahme der primären TUF „Diffusionskoeffizient“ und „Tortuosität (Kanalisation)“ 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

$$k(\phi) \approx \frac{\phi^3}{(1-\phi)^2} \quad (5.20)$$

ermittelt.

Die übrigen primären TUF wurden als abgeleitete TUF direkt umgesetzt.

5.3.1 Mikrobiell beeinflusste Korrosion

Mikrobiell beeinflusste Korrosion berücksichtigt alle mikrobiellen Einflüsse auf Korrosionsprozesse, z. B. über die produzierten organischen Säuren, Nitrat, extrazelluläre Polymere oder über eine direkte anaerobe Eisenoxidation, mit Ausnahme des Einflusses durch die Produktion von H_2S , welcher durch die abgeleitete TUF „Korrosion durch H_2S “ aufgrund des abweichenden Mediums (Bilanzierungsgröße „ H_2S -Menge“) abgedeckt wird. Die TUF „Mikrobiell beeinflusste Korrosion“ (Abb. 5.8) ergibt sich als Produkt der TUF „Mikrobielle Aktivität“ (Gleichung (11)) sowie der TUF „Korrosionsrate“ (Gleichung (9)).

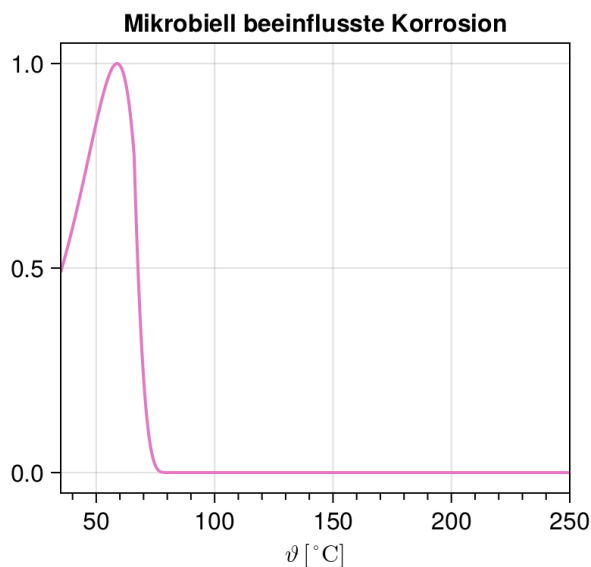


Abb. 5.8 Abgeleitete TUF „Mikrobiell beeinflusste Korrosion“ am Behälter

5.3.2 Korrosion

Die abgeleitete TUF „Korrosion“ (Abb. 5.9) bezieht sich auf sämtliche anaerobe Korrosionsprozesse am Behälter, die nicht direkt durch Mikroben oder H_2S verursacht sind. Die Korrosion wird wesentlich durch die Verfügbarkeit von Lösung beeinflusst und ergibt sich daher als Produkt der Bilanzierungsgröße „Lösungsmenge“ und der TUF „Korrosionsrate“ (Gleichung (9)).

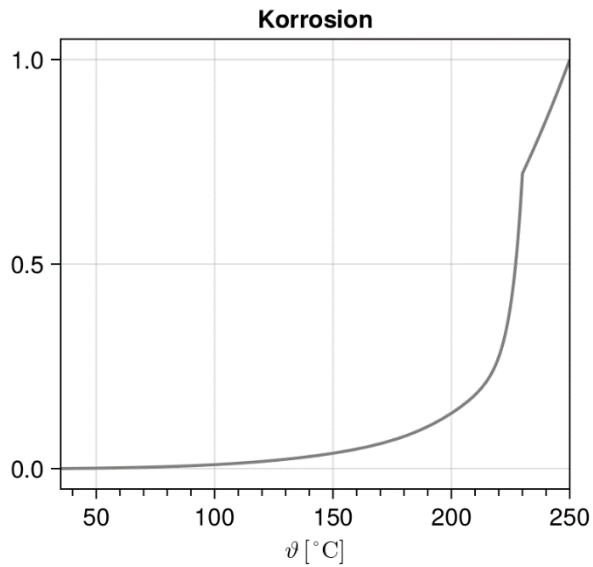


Abb. 5.9 Abgeleitete TUF „Korrosion“ am Behälter

5.3.3 Korrosion durch H_2S

Die durch Schwefelwasserstoff verursachte Korrosion wird in der abgeleiteten TUF „Korrosion durch H_2S “ als Produkt der Bilanzierungsgröße „ H_2S -Menge“ sowie der primären TUF „Korrosionsrate durch H_2S “ (Gleichung (10)) dargestellt (Abb. 5.10).

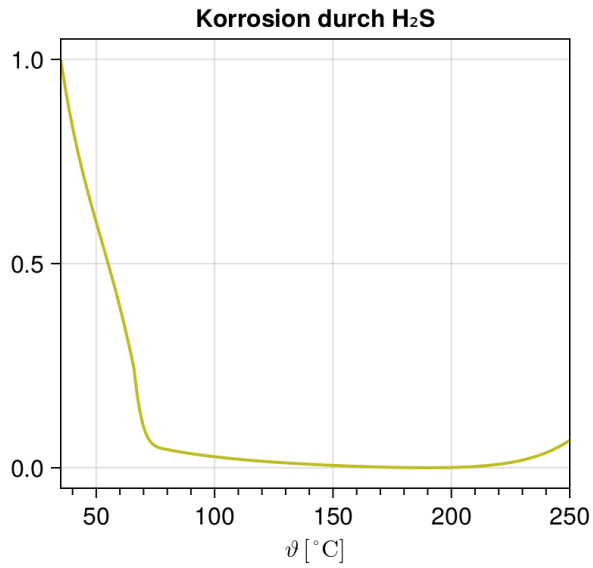


Abb. 5.10 Abgeleitete TUF „Korrosion durch H₂S“ am Behälter

5.3.4 Lösungsdruckänderung

Die abgeleitete TUF „Lösungsdruckänderung“ (Abb. 5.11) stellt die Beeinflussung des Lösungsdruckes im Endlagersystem durch Lösungsverfügbarkeit und temperaturbedingte Druckänderung dar. Sie ergibt sich als Produkt der primären TUF „Lösungsdruck“ (Gleichung (6)) sowie der Bilanzierungsgröße „Lösungsmenge“.

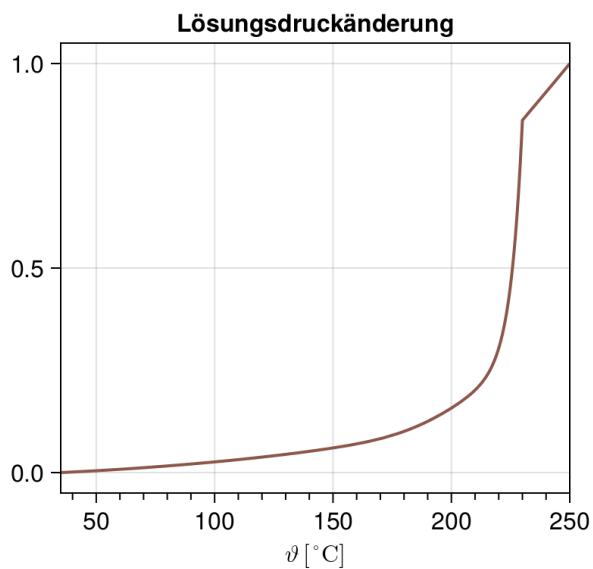


Abb. 5.11 Abgeleitete TUF „Lösungsdruckänderung“

5.3.5 Gasdruckänderung

Die abgeleitete TUF „Gasdruckänderung“ wird als Produkt der Bilanzierungsgröße „Gasmenge“ sowie der primären TUF „Gasdruck“ (Gleichung (7)) bestimmt. Da die Gasmenge als konstant angenommen wird, ist in Abb. 5.12 lediglich die lineare Temperaturabhängigkeit der primären TUF „Gasdruck“ zu sehen. Entsprechend der unterstellten Randbedingung, dass die im Versatz und in der ALZ vorhandene Gasmenge über das Verschlussystem abfließen kann, wird im Folgenden davon ausgegangen, dass sich kein Gasüberdruck aufgrund der Gasdruckänderung aufbauen kann. Daher wird diese abgeleitete TUF bei der Ableitung der GTUF zunächst zurückgestellt.

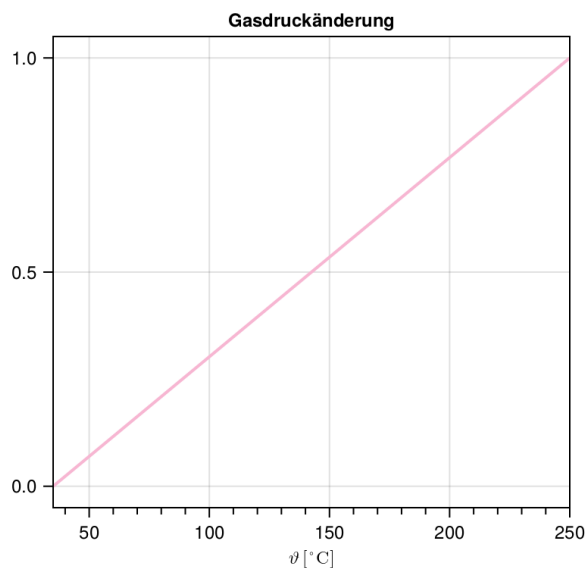


Abb. 5.12 Abgeleitete TUF „Gasdruckänderung“

5.3.6 Kompaktion (Kriechbeschleunigung)

Die abgeleitete TUF „Kompaktion (Kriechbeschleunigung)“ (Abb. 5.13) ist identisch zur entsprechenden primären TUF (Gleichung (4)) und wird als integritätsrelevant in den Komponenten Versatz und ALZ erachtet (Abb. 5.13).

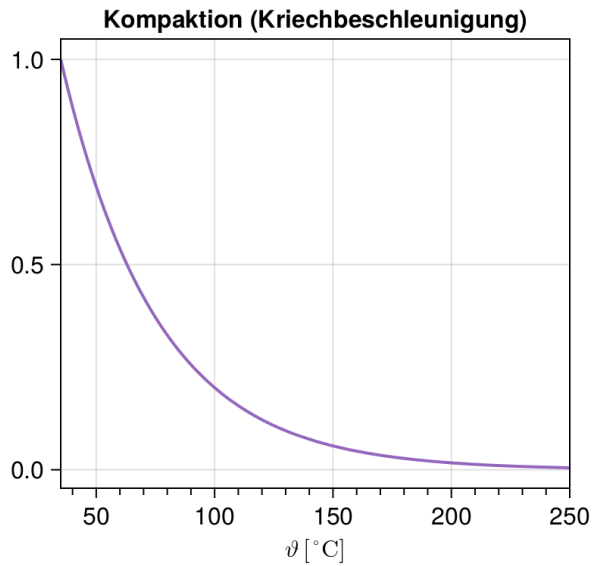


Abb. 5.13 Abgeleitete TUF „Kompaktion (Kriechbeschleunigung)“ in Versatz und ALZ

5.3.7 Kriechfähigkeit (Steinsalz)

Das für die primäre TUF „Kriechfähigkeit“ verwendete BGR(b)-Modell /HUN 94/ (Gleichung (5)) basiert auf einem Potenzansatz für duktileres homogenes isotropes Material (d. h. keine Porosität, viskoplastisches Materialverhalten). Für die ALZ mit einem signifikanten Gasanteil im Porenraum wird stattdessen das Terzaghi-Prinzip verwendet, so dass die TUF „Kompaktion (Kriechbeschleunigung)“ auch in der ALZ verwendet wird und die TUF „Kriechfähigkeit“ (Abb. 5.14) für die Komponente ewG.

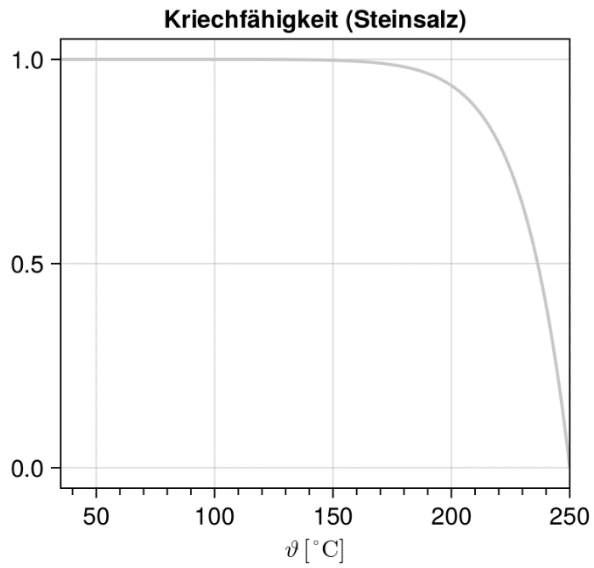


Abb. 5.14 Abgeleitete TUF „Kriechfähigkeit (Steinsalz)“

5.3.8 Thermische Zersetzung

In der Komponente ewG wird die TUF „Thermische Zersetzung“ (Gleichung (1)) bei der Integritätsbewertung berücksichtigt (Abb. 5.15).

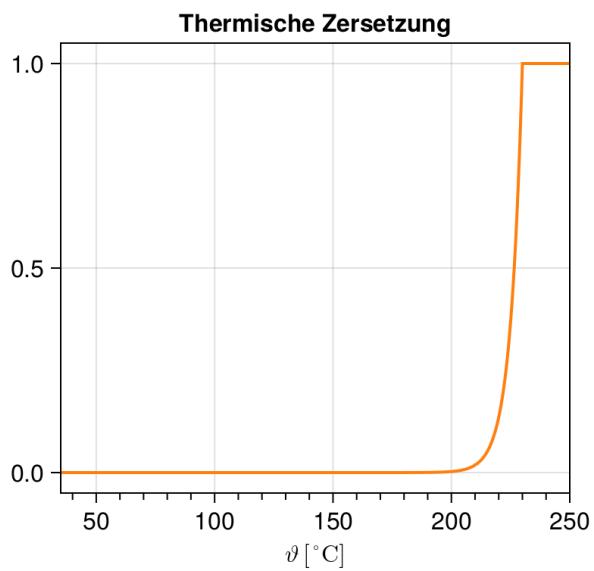


Abb. 5.15 Abgeleitete TUF „Thermische Zersetzung“

5.3.9 Kornbruch

In der Komponente ewG wird die TUF „Kornbruch“ (Gleichung (2)) bei der Integritätsbewertung berücksichtigt (Abb. 5.16).

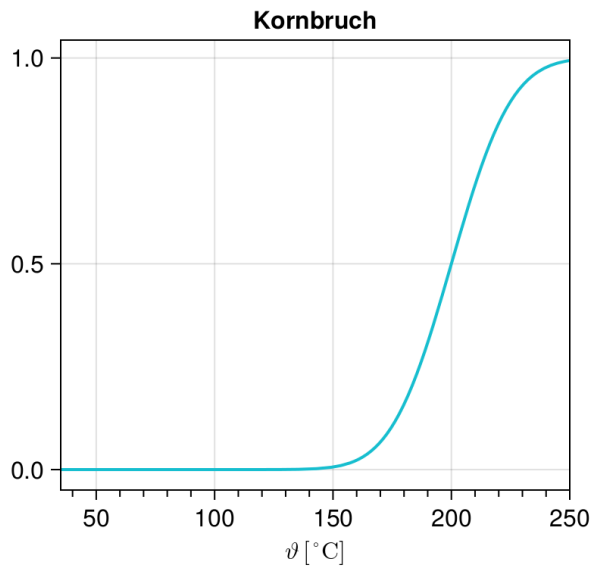


Abb. 5.16 Abgeleitete TUF „Kornbruch“

5.3.10 Behälterabsinken

In der Komponente ewG wird die TUF „Behälterabsinken“ (Gleichung (8)) bei der Integritätsbewertung berücksichtigt (Abb. 5.17).

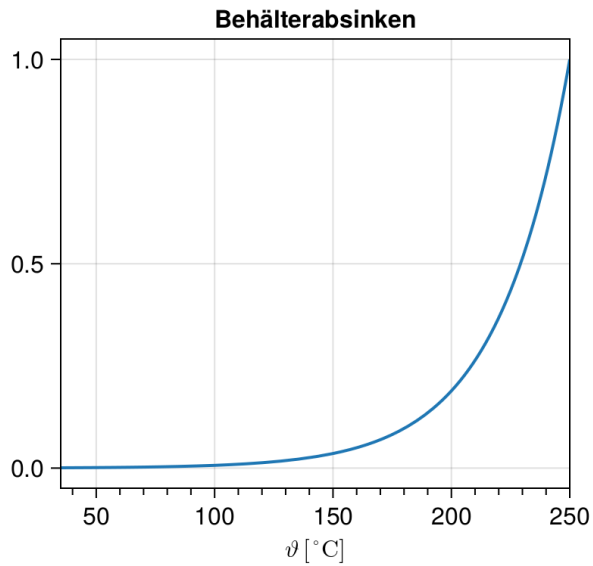


Abb. 5.17 Abgeleitete TUF „Behälterabsinken“

5.3.11 Advektion / Dispersion (Lösung)

Zur Ableitung der TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ werden entsprechend dem Advektionsterm in der Transportgleichung die primären TUF „Dichte“ (Gleichung (16)) und „Lösungsdruck“ (Gleichung (6)) mit der Bilanzierungsgröße „Lösungsmenge“ sowie der aus der Bilanzierungsgröße „Porosität“ nach Gleichung (20) abgeleiteten „Permeabilität“ multipliziert und durch die primäre TUF „Viskosität“ (Gleichungen (13) und (14)) dividiert. Aus den unterschiedlichen Porositätsbilanzen für die Komponenten Versatz und ALZ ergeben sich auch entsprechend andere abgeleitete TUF. Aus Abb. 5.18 und Abb. 5.19 wird deutlich, dass die Sensitivität des Ergebnisses in Bezug auf die Porositätsbilanz sehr stark ausgeprägt ist.

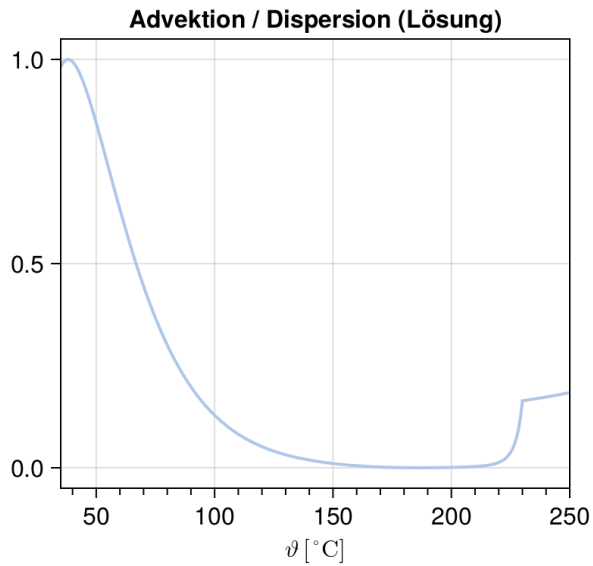


Abb. 5.18 Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ im Versatz

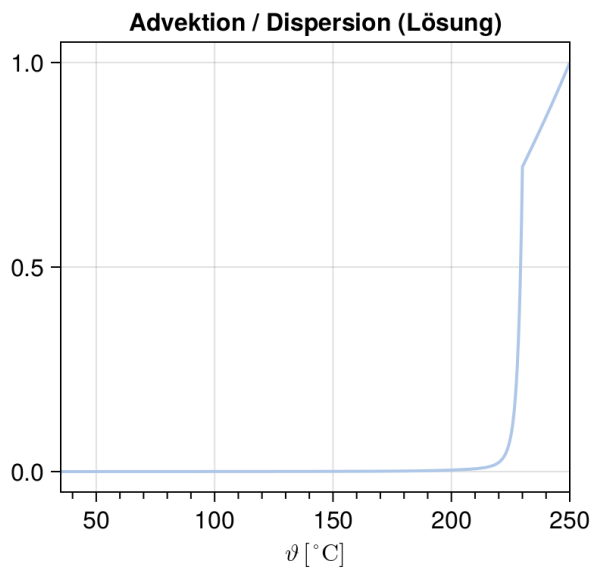


Abb. 5.19 Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ in der ALZ

5.3.12 Advektion / Dispersion (Gas)

Zur Ableitung der TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ wird entsprechend dem Advektionsterm in der Transportgleichung die als konstant betrachtete Gasdichte mit der primären TUF „Gasdruck“ sowie der aus der Bilanzierungsgröße „Porosität“ nach Gleichung (20) abgeleiteten „Permeabilität“ multipliziert und durch die primäre TUF „Viskosität“ (Gleichung (15)) dividiert. Aus den unterschiedlichen Porositätsbilanzen für

die Komponenten Versatz und ALZ ergeben sich auch entsprechend andere abgeleitete TUF. Aus Abb. 5.20 und Abb. 5.21 wird deutlich, dass die Sensitivität des Ergebnisses in Bezug auf die Porositätsbilanz sehr stark ausgeprägt ist.

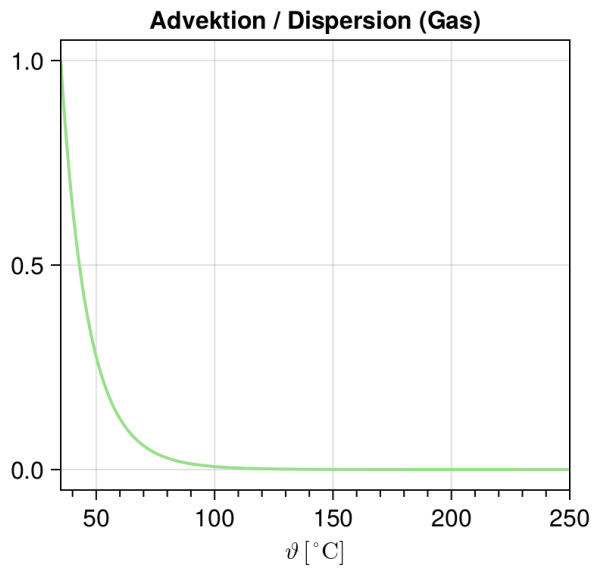


Abb. 5.20 Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ im Versatz

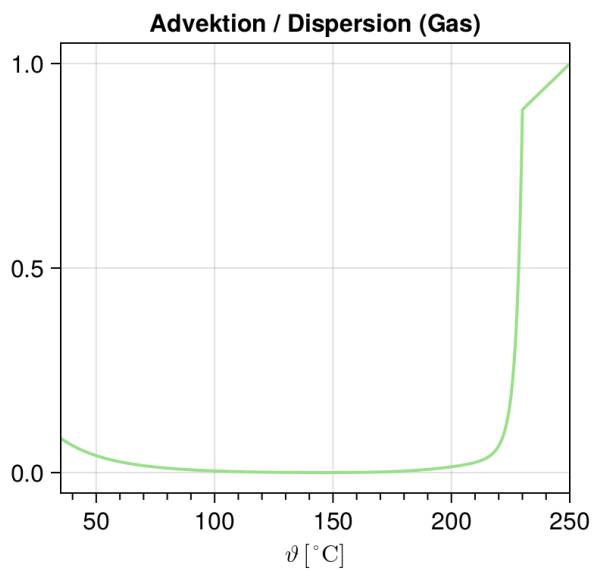


Abb. 5.21 Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ in der ALZ

5.3.13 Diffusion (Lösung)

Die abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ ergibt sich aus dem Diffusionsterm der Transportgleichung als Produkt aus den Bilanzierungsgrößen „Porosität“ und „Lösungsmenge“ sowie der primären TUF „Diffusionskoeffizient“ (Gleichung (17)). Aus Abb. 5.22 und Abb. 5.23 wird deutlich, dass die Sensitivität des Ergebnisses in Bezug auf die Porositätsbilanz sehr stark ausgeprägt ist.

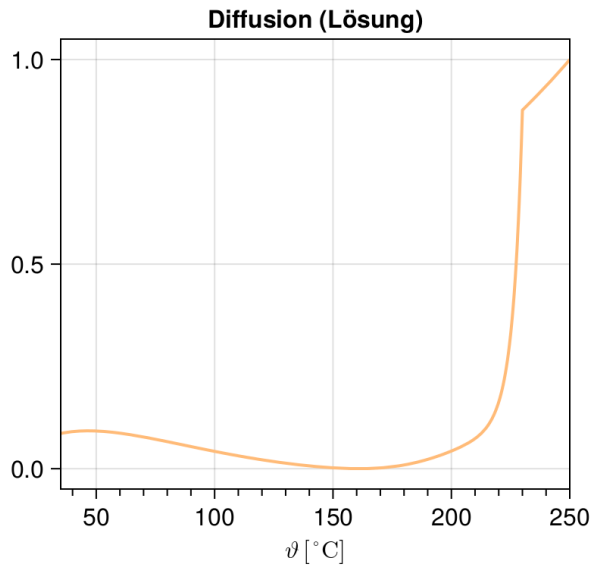


Abb. 5.22 Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ im Versatz

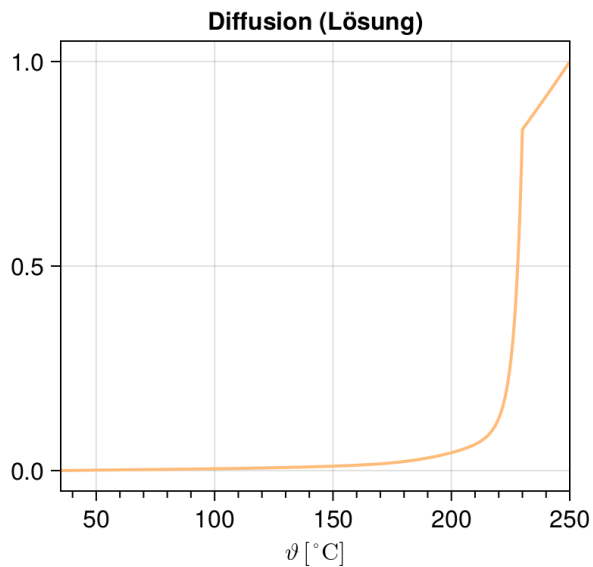


Abb. 5.23 Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ in der ALZ

5.3.14 Diffusion (Gas)

Die abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ ergibt sich aus dem Diffusionsterm der Transportgleichung als Produkt aus der Bilanzierungsgrößen „Porosität“ und der primären TUF „Diffusionskoeffizient“ (Gleichung (18)). Aus Abb. 5.24 und Abb. 5.25 wird deutlich, dass die Sensitivität des Ergebnisses in Bezug auf die Porositätsbilanz sehr stark ausgeprägt ist.

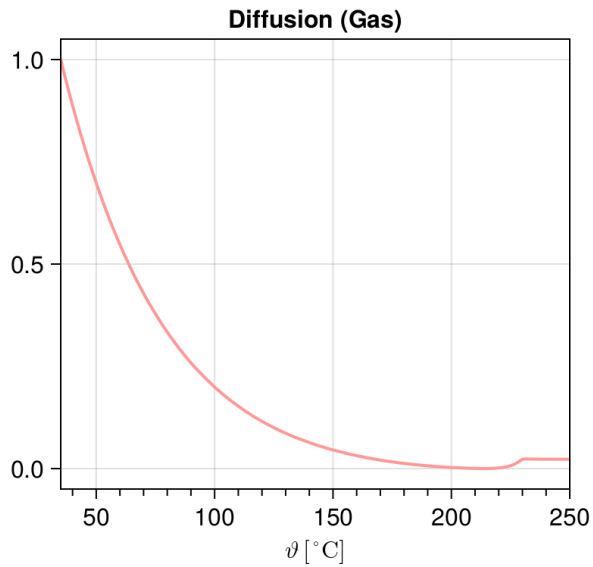


Abb. 5.24 Abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ im Versatz

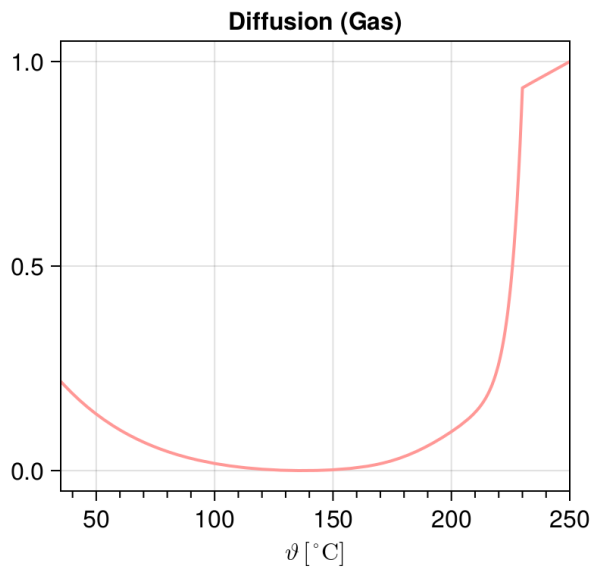


Abb. 5.25 Abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ in der ALZ

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 oder additiv bzw. multiplikativ 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 wichtiges Werkzeug, welches die Ergebnisse der Analyse erheblich beeinflusst. 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 mikrobielle Aktivität ist bekannt, dass sie in Salzformationen bis höchstens 80 °C stattfinden kann /MCG 00/. Allerdings liegt für die letztere keine detaillierte Temperaturabhängigkeit vor und die primäre TUF „Mikrobielle Aktivität“ wurde basierend auf dieser scharfen Grenze und der Tatsache, dass die höchste in bisherigen Untersuchungen festgestellte, von Haloarchaeen noch tolerierbare Temperatur bei 66°C liegt /KIM 18/, als ein bis hin zu 80 °C vergleichsweise scharf abfallendes Polynom willkürlich (per Expertenmeinung) beschrieben. Für thermochemische Sulfatreduktion ist bekannt, dass sie bei Temperaturen oberhalb von 120 °C stattfindet /CAI 22/ (siehe Kap. 5.1.14). Die ausschließliche Verwendung einer Expertenmeinung auf ähnliche Weise wie für die primäre TUF „Mikrobielle Aktivität“ 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 Kernstrahlungsmessungen 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. Nur zwei abgeleitete TUF wurden mit einer geringeren Wichtung versehen. Dies sind:

1. „Behälterabsinken“: Anhand der zwei bei 100 °C und 150 °C berechneten Absinkraten /TOU 23/, welche per Expertenmeinung hergeleitet wurden, erhielt die TUF eine abweichende Wichtung von 0,1. Die in der Arbeit /TOU 23/ modelltheoretisch erhaltenen Absinkraten belegen je nach verwendetem Stoffgesetz bei der gleichen Temperatur einen Wertebereich von fünf Größenordnungen, so dass der Einfluss des abgebildeten assoziierten Prozesses bei der Priorisierung dementsprechend zwischen „gefährdend für den sicheren Einschluss“ und „vernachlässigbar“ bewertet werden kann. Diese ausgeprägte Ungewissheit begründete die Vergabe der im Vergleich zu anderen TUF deutlich geringeren Wichtung und verdeutlicht den Forschungsbedarf für diesen Prozess.
2. „Kornbruch“: Nach Expertenmeinung ist durch den Kornbruch eine Bildung von Fluidwegsamkeiten und damit eine Integritätsverletzung im ewG nicht zu erwarten, weshalb der TUF eine Wichtung von 0,1 zugewiesen wird.

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 wurde, 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 Temperatur 250 °C ergibt dann die andere Grenze des gesuchten Temperaturbereiches. Die folgenden Abbildungen stellen dieses Verfahren für die integritätsrelevanten GTUF für alle betrachteten ELS-Komponenten sowie für die RN-transportrelevanten GTUF für die ELS-Komponenten Versatz und Auflockerungszone dar. Am Behälter und im Wirtsgestein (ewG) werden keine Transportprozesse berücksichtigt (siehe Randbedingungen und Prämissen Kapitel 2.3).

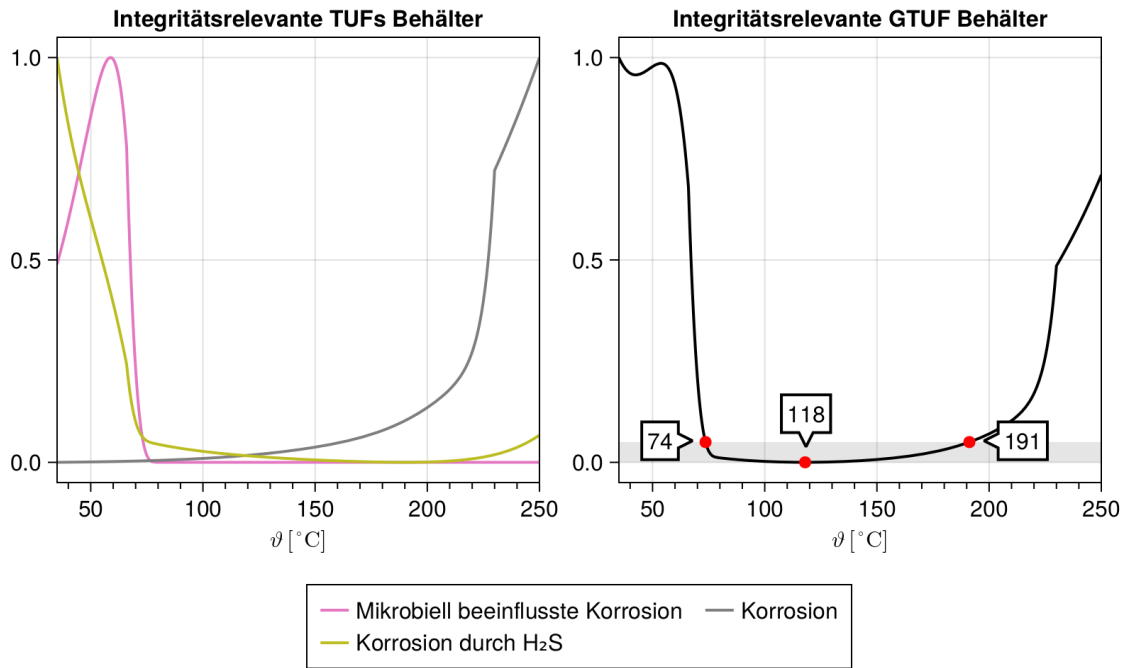


Abb. 6.1 Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Behälter (rechts)

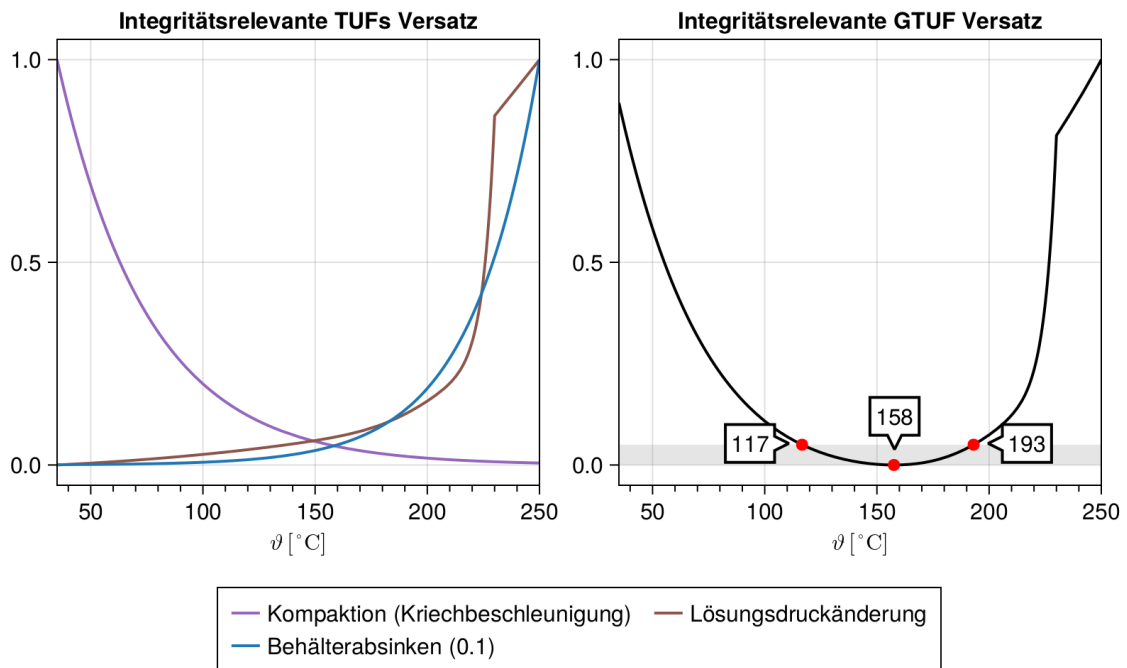


Abb. 6.2 Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Versatz (rechts)

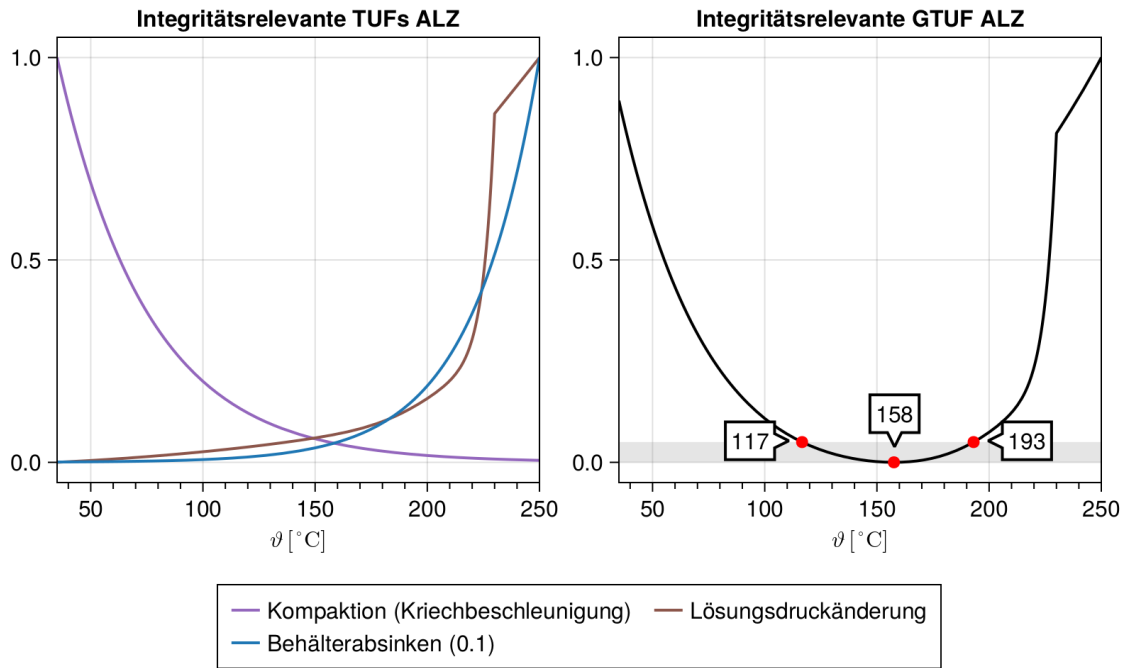


Abb. 6.3 Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für die ALZ (rechts)

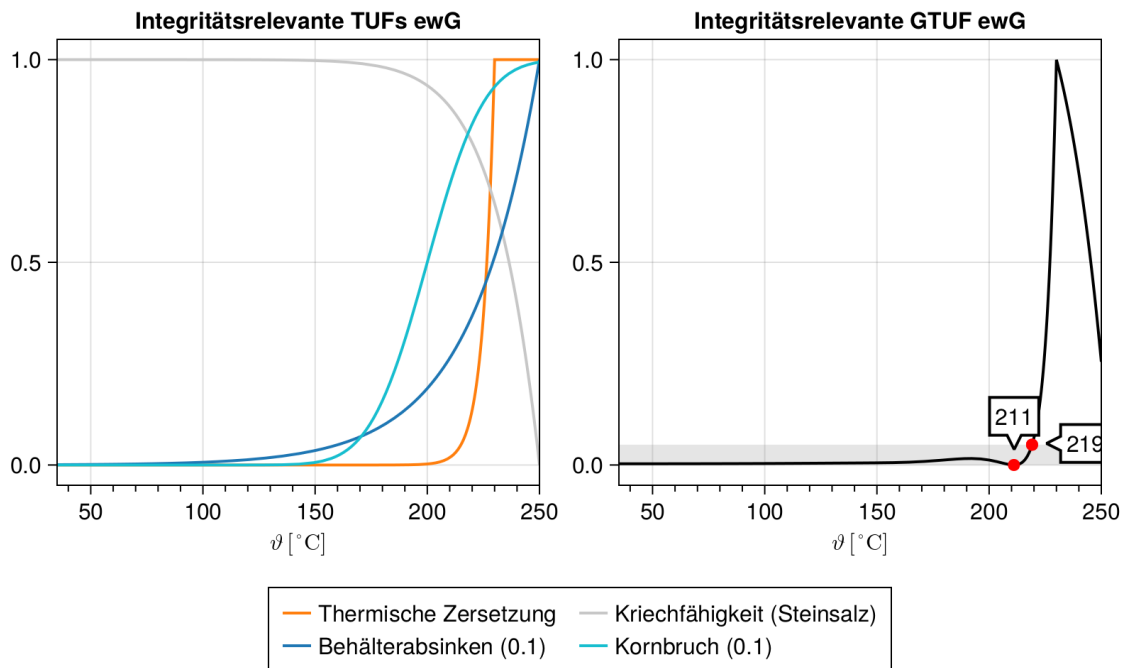


Abb. 6.4 Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den ewG (rechts)

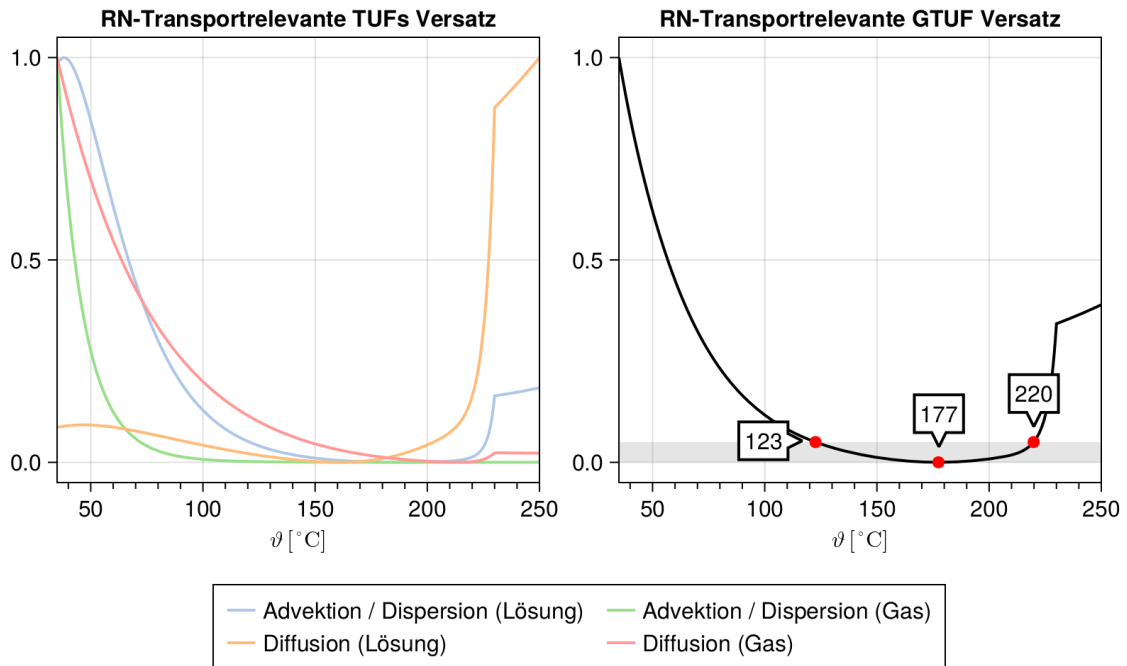


Abb. 6.5 Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für den Versatz (rechts)

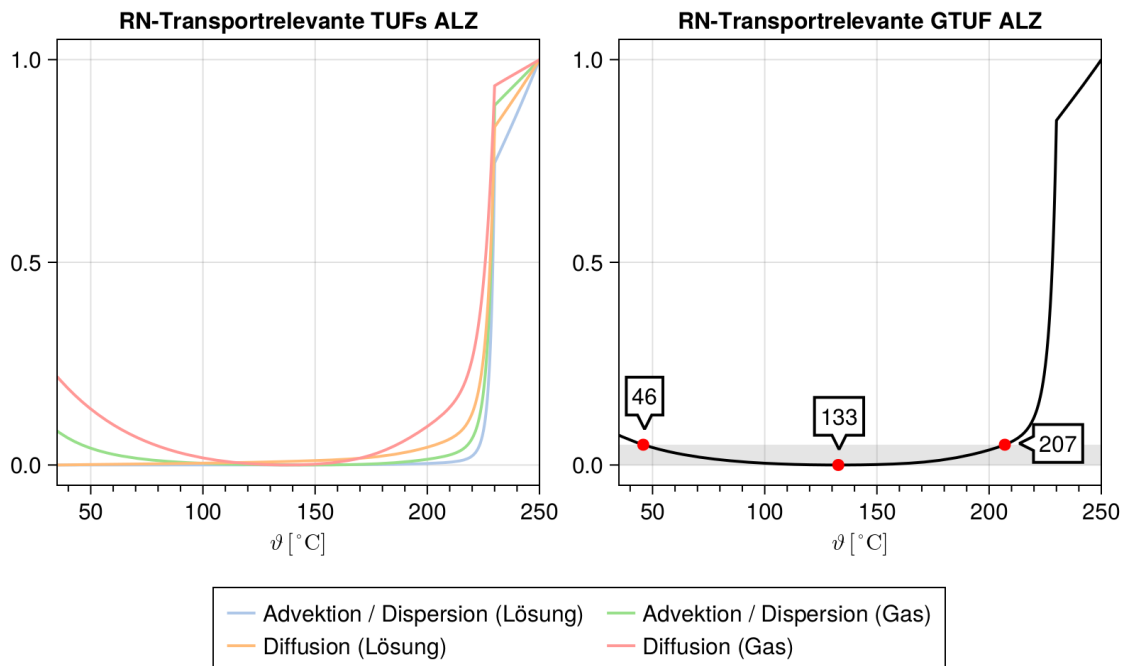


Abb. 6.6 Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für die ALZ (rechts)

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, insbesondere im Steinsalz. Aus den GTUF zur Integrität wird somit ein Temperaturbereich abgeleitet, der als günstig angesehen wird. Ist der Bereich für die Fragestellung 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. 6.2 abgeleiteten Temperaturverträglichkeiten für die betrachteten Komponenten sind in Tab. 7.1 zusammengefasst.

Tab. 7.1 Günstige Temperaturbereiche für die Integrität der Komponenten im Wirtsgestein Steinsalz

Komponente	Günstiger Temperaturbereich		
	Untere Grenze*	Minimum GTUF	Obere Grenze*
Behälter	70	118	190
Versatz	120	158	190
ALZ	120	158	190
Wirtsgestein (ewG)	< GBT	211	220

* auf die Zehnerstelle gerundet

Die Übersicht zeigt, dass im Steinsalz für einen sehr großen Bereich von 120 bis 190 °C für alle Komponenten günstige Temperaturen vorliegen, d.h. eine Temperatur in diesem Bereich ist prinzipiell als günstig einzuordnen. Die maximal als günstig zu bezeichnende Temperatur liegt somit bei 190 °C. Zur weiteren Eingrenzung werden neben den Minima in Tab. 7.1 auch hinsichtlich des Transports von Radionukliden günstige Temperaturbereiche einbezogen (Tab. 7.2).

Tab. 7.2 Günstige Temperaturbereiche hinsichtlich des Transports von Radionukliden in den Komponenten im Wirtsgestein Steinsalz

Komponente	Günstiger Temperaturbereich		
	Untere Grenze*	Minimum GTUF	Obere Grenze*
Behälter**	-	-	-
Versatz	120	177	220
ALZ	50	133	210
Wirtsgestein (ewG)**	-	-	-

* auf die Zehnerstelle gerundet

** am Behälter und im Wirtsgestein (ewG) werden keine Transportprozesse berücksichtigt (siehe Randbedingungen und Prämissen Kapitel 2.3)

Als entscheidungsrelevant werden die Minima der Komponente Versatz angesehen. Dies begründet sich in der Tatsache, dass der Entwicklung des Versatzes sowohl hinsichtlich der Integrität des ewG als auch beim möglichen Transport von Radionukliden im Sicherheitskonzept für ein Endlager im Salz eine besondere Rolle zufällt. Aus den beiden Minima im Versatz wird als günstige Temperatur 170 °C gewählt.

7.2 Ausblick und weitere Arbeiten

Die hier vorgenommene Beurteilung der Temperaturverträglichkeit stützt sich auf die zu Beginn aufgestellten Prämissen. In weiterführenden Arbeiten könnten diese Prämissen angepasst werden. Denkbar ist dies aufgrund einer Anpassung des Endlagerkonzeptes sowie eines veränderten Kenntnisstandes eines Prozesses oder der Standortbedingungen.

Genauso ist es möglich, den Einfluss der Prämissen auf die identifizierte Temperatur auszutesten. Hier zu nennen ist beispielsweise die Prämisse, dass die Mächtigkeit der Steinsalzformation bzw. die Entfernung der Auffahrungen von Kalisalzflözen (z.B. Carnallit), Anhydritlagen (z.B. Hauptanhydrit) und Tonschichten hinreichend groß ist, um die Relevanz der Einwirkungen von Kalisalzen, Anhydrit/Gips und Tonmineralen als vernachlässigbar einzustufen. Eine geänderte Annahme könnte sein, dass weitere hydratisierte Sulfatminerale wie Gips und Bassanit im Wirtsgestein vorhanden sind /JOR 15/. Als Folge müsste u.a. die TUF „Thermische Zersetzung“, die derzeit nur Polyhalit berücksichtigt, um den entsprechenden Prozess erweitert werden.

Denkbar wäre auch eine geänderte Annahme zum Gastransport aus dem Einlagerungsbereich, indem unterstellt wird, dass der Versatz sehr schnell kompaktiert und eine sehr geringe Restporosität aufweist, sich gleichzeitig die ALZ zügig schließt und Gas gar nicht mehr oder nur noch über die Verschlussbauwerke abfließen kann. Als Folge einer solchen Entwicklung müsste die Temperaturverträglichkeit bei höherem Gasdruckaufbau durch eine angepasste TUF „Gasdruckänderung“ bewertet werden.

Literatur

- /BER 20a/ Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Eickemeier, R., Fahland, S., Flügge, J., Frenzel, B., Hammer, J., Kindlein, J., Liu, W., Maßmann, J., Mayer, K.-M., Mönig, J., Mrugalla, S., Müller-Hoeppe, N., Reinhold, K., Rübel, A., Schubarth-Engelschall, N., Simo, E., Thiedau, J., Thiemeyer, T., Weber, J.R., Wolf, J.: RESUS: Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in flach lagernden Salzformationen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, GRS-568, ISBN 978-3-947685-54-7, August 2020.
- /BER 20b/ Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Eickemeier, R., Fahland, S., Flügge, J., Frenzel, B., Hammer, J., Kindlein, J., Liu, W., Maßmann, J., Mayer, K.-M., Mönig, J., Mrugalla, S., Müller-Hoeppe, N., Reinhold, K., Rübel, A., Schubarth-Engelschall, N., Simo, E., Thiedau, J., Thiemeyer, T., Weber, J.R., Wolf, J.: RESUS: Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in flach lagernden Salzformationen bei einer höheren Auslegungstemperatur. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, GRS-570, ISBN 978-3-947685-56-1, August 2020.
- /BER 20c/ Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Eickemeier, R., Fahland, S., Flügge, J., Frenzel, B., Hammer, J., Kindlein, J., Liu, W., Maßmann, J., Mayer, K.-M., Mönig, J., Mrugalla, S., Müller-Hoeppe, N., Reinhold, K., Rübel, A., Schubarth-Engelschall, N., Simo, E., Thiedau, J., Thiemeyer, T., Weber, J.R., Wolf, J.: RESUS: Grundlagen zur Bewertung eines Endlagersystems in steil lagernden Salzformationen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln, GRS-569, ISBN 978-3-947685-55-4, August 2020.
- /BGE 22/ Bundesgesellschaft für Endlagerung: Methodenbeschreibung zur Durchführung der repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen gemäß Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung, Peine, 2022.

- /BOL 08/ Bollingerfehr, W., Filbert, W., Pöhler, M., Tholen, M., Wehrmann, J.: AP 1.2 - Konzeptionelle Endlagerplanung und Zusammenstellung des endzulagernden Inventars. Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW: ISIBEL. TEC-20-2008-AP. DBE TECHNOLOGY GmbH, Peine, 2008.
- /BOL 11/ Bollingerfehr, W., Filbert, W., Lerch, C., Tholen, M.: Endlagerkonzepte, Bericht zum Arbeitspaket 5, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben. GRS-272. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2011.
- /BOL 18/ Bollingerfehr, W., Bertrams, N., Minkley, W., Buhmann, D., Mönig, J., Eickemeier, R., Popp, T., Fahland, S., Prignitz, S., Filbert, W., Reinhold, K., Hammer, J., Simo, E., Kindlein, J., Thiemeyer, T., Knauth, M., Völkner, E., Liu, W., Wolf, J.: Concept developments for a generic repository for heat-generating waste in bedded salt formations in Germany. (KOSINA) Synthesebericht BGE TEC 2018-13. BGE TECHNOLOGY GmbH, Peine, 2018.
- /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.
- /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.
- /CAI 22/ Cai, C., Li, H., Li, K., & Wang, D.: Thermochemical sulfate reduction in sedimentary basins and beyond: A review. Chemical Geology, 121018, 2022. DOI: 10.1016/j.chemgeo.2022.121018

- /CHA 70/ Chapman, S., Cowling, T.G.: The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases (3rd ed.), Cambridge University Press, 1970.
- /CUE 93/ Cuevas, C., Miralles, L., Teixidor, P., Garcia Veigas, J., Dies, X., Ortega, X., Pueyo, J. J.: Spanish participation in the Haw Project: Laboratory investigations on Gamma irradiation effects in rock salt (No. ENRESA-04/93). Empresa Nacional de Residuos Radiactivos, 1993.
- /CUE 95/ De Las Cuevas, C., Pueyo, J. J. : The influence of mineralogy and texture in the water content of rock salt formations. Its implication in radioactive waste disposal. Applied geochemistry, 10(3), 317-327, 1995.
- /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 Tongestein. Bericht GRS-754. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Braunschweig, 2024.
- /CZA 24b/ Czaikowski, O., Förster, B., Hinze, M., Mayer, K.-M., Meleshyn, A., Middelhoff, M., Rübél, A., Wieczorek, K., Wolf, J.: Ableitung der wirtsgesteinspezifischen Temperaturverträglichkeit von Endlagerkomponente – Wirtsgestein Kristallin. Bericht GRS-755. 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.
- /ESK 22/ Entsorgungskommission: Stellungnahme der Entsorgungskommission zum 100 Grad Celsius Kriterium in § 27 (4) des Standortauswahlgesetzes. Stellungnahme der Entsorgungskommission (ESK) vom 12.05.2022.

- /FAB 83/ Fabricius, J.: Studies of Fluid Inclusions in Halite and Euhedral Quartz Crystals from Salt Domes in the Norwegian-Danish Basin. Sixth International Symposium on Salt 1983 Vol. 1, 1983.
- /FRE 85/ Freude, E.: Quellterm für die Mobilisierung von Radionukliden aus verglastem Abfall. - Projekt Sicherheitsstudien Entsorgung (PSE), Fachband 10; Berlin, 1985.
- /FRE 20/ Freeze, G., Sevougian, S. D., Kuhlman, K., Gross, M., Wolf, J., Buhmann, D., Bartol, J., Leigh, C., Mönig, J.: Generic FEPs Catalogue and Salt Knowledge Archive. SANDIA REPORT SAND2020-13186, 2020.
- /GAO 17/ Gao, S., Jin, P., Brown, B., Young, D., Nešić, S., Singer, M. : Effect of high temperature on the aqueous H₂S corrosion of mild steel. Corrosion, 73(10), 1188-1191, 2017. DOI: 10.5006/2523
- /GEV 81/ Gevantman, L.H. (Ed.): Physical Properties Data for Rock Salt, NBS Monograph 167, U.S. Department of Commerce / National Bureau of Standards, Washington D.C., January 1981.
- /GOM 21/ Gómez Romera, J.J.: jgomera/iapws: (v1.5.2). Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.4744318>, 2021.
- /HUN 94/ Hunsche, U., Schulze, O.: Das Kriechverhalten von Steinsalz, Kali und Steinsalz, Bd. 11, 8/9, 1994.
- /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.
- /JOR 15/ Jordan, A. B., Boukhalfa, H., Caporuscio, F. A., Robinson, B. A., Stauffer, P. H.: Hydrous mineral dehydration around heat-generating nuclear waste in bedded salt formations. Environmental science & technology, 49(11), 6783-6790, 2015.

- /KIE 17/ Kienzler, B.: F&E-Arbeiten zur Korrosion von Endlager-Behälterwerkstoffen im INE. KIT Scientific Reports KIT-SR 7729, Karlsruhe Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, 2017.
- /KIM 18/ Kim, Y. B., Kim, J. Y., Song, H. S., Lee, C., Ahn, S. W., Lee, S. H., Jung, M. Y., Rhee, J.-K., Hyun, D.-W., Bae, J.-W., Roh, S. W.: Novel haloarchaeon *Natrinema thermophila* having the highest growth temperature among haloarchaea with a large genome size, *Scientific Reports* (8) 7777, 2018. DOI: 10.1038/s41598-018-25887-7
- /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.
- /LAV 05/ LaVerne, J. A., Tandon, L.: H₂ and Cl₂ production in the radiolysis of calcium and magnesium chlorides and hydroxides. *The Journal of Physical Chemistry A*, 109(12), 2861-2865, 2015.
- /MCG 00/ McGenity, T. J., Gemmell, R. T., Grant, W. D., Stan-Lotter, H.: Origins of halophilic microorganisms in ancient salt deposits: Minireview. *Environmental Microbiology*, 2(3), 243-250, 2000.
- /MAC 01/ Machel, H. G.: Bacterial and thermochemical sulfate reduction in diagenetic settings, old and new insights. *Sedimentary Geology*, Bd. 140, 1-2: 143-175, 2001. DOI: 10.1016/s0037-0738(00)00176-7
- /MCG 00/ McGenity, T. J.; Gemmell, R. T.; Grant, W. D. und Stan-Lotter, H.: Origins of halophilic microorganisms in ancient salt deposits, *Environmental Microbiology* 2 (3): 243-250, 2000. DOI:10.1046/j.1462-2920.2000.00105.x

- /MEL 16/ Meleshyn, A., Weyand, T., Bracke, B., Kull, H., Wieczorek, K.: Wärmeentwicklung/ Gesteinsverträglichkeit. Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe K-MAT 64, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS gGmbH, Köln, 2016.
- /MIC 99/ Michel, R., Kirchhoff, K.: Nachweis-, Erkennungs- und Vertrauensgrenzen bei Kernstrahlungsmessungen. TÜV-Verlag, 1999.
- /MOE 12/ Mönig, J., Buhmann, D., Rübel, A., Wolf, J., Baltés, B., Fischer-Appelt, K.: Sicherheits- und Nachweiskonzept. Bericht zum Arbeitspaket 4, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-277, ISBN: 978-3-939355-53-3, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012.
- /MÜL 12/ Müller-Hoeppe, N., Buhmann, D., Czaikowski, O., Engelhardt, H. J., Herbert, H. J., Lerch, C., Linkamp, M., Wieczorek, K., Xie, M.: Integrität geotechnischer Barrieren: Teil 1 Vorbemessung, Bericht zum Arbeitspaket 9.2, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-287, 2012.
- /NEA 19/ NEA: International Features, Events and Processes (IFEP) List for the Deep Geological Disposal of Radioactive Waste, Version 3.0, NEA/RWM/R(2019)1, 2019.
- /OLI 03/ Olivella, S., Luna, M., Gens, A. : Thermo-mechanical analyses of a large-scale heating test in salt rock. In VII International Conference on Computational Plasticity, COMPLAS VII, CIMNE, Barcelona, 2003.
- /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., Griffault, L., Gustafsson, E., Hama, K; Yoshida, H., Kotelnikova, S., Pedersen, K., Michaud, V., Trotignon, L., Rivas Perez, J., Tullborg, E. L.: O₂ depletion in granitic media. The Rex project (No. SKB-TR--01-05). Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co.
- /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.
- /ROE 84/ Roedder, E.: The fluids in salt. *American Mineralogist*, 69(5-6), 413-439 1984.
- /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.
- /ROT 88/ Rothfuchs, T., Duijves, K.: Das HAW-Projekt: Demonstrationseinlagerung hochradioaktiver Abfälle im Salzbergwerk Asse. Zwischenbericht 1985-1987. Kommission der Europäischen Gemeinschaften (KEG), Kernforschung und -technologie, EUR 1175 DE: Luxemburg 1988.
- /TOU 23/ Tounsi, H., Rutqvist, J., Hu, M., Wolters, R., Lerche, S. : Long-term sinking of nuclear waste canisters in salt formations by low-stress creep at high temperature. *Acta Geotechnica*, 1-16, 2023.
- /TRU 14/ Truche, L., Bazarkina, E. F., Barré, G., Thomassot, E., Berger, G., Dubessy, J., Robert, P.: The role of S⁻³ ion in thermochemical sulphate reduction: geological and geochemical implications. *Earth and Planetary Science Letters*, 396, 190-200, 2014. DOI: 10.1016/j.epsl.2014.04.018

- /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.
- /WIE 10/ Wieczorek, K., Forster, B., Rothfuchs, T., Zhang, C. L., Olivella, S., Heemann, U., Lerch, C., Pudewills, A., Kamlot, P., Grupa, J., Herchen, K., Spiers, C. J.: The Excavation Damaged Zone in Rock Salt: Outcome of the EC Project THERESA. In *ARMA US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium* (pp. ARMA-10). ARMA, 2010.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	POLLUX-10-Behälter, mit gezogenen Brennstäben aus 10 DWR-BE /BGE 22/	8
Abb. 2.2	Querschnittsprofil der Einlagerungsstrecke 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	20
Abb. 3.2	Komponenten und einwirkende Prozesse in einem Endlagersystem /FRE 20/.....	21
Abb. 3.3	Zeitliche Entwicklung der Temperatur an ausgewählten Bereichen in einem ELS in flach lagernden Salzformationen, oben: Auslegungstemperatur 100 °C /BER 20a/, unten: Auslegungstemperatur 150 °C /BER 20b/.....	22
Abb. 5.1	Charakteristische Masseverlustkurven für Ton- und Polyhalit-haltige sowie -freie Salzsteine /KUH 13/.....	43
Abb. 5.2	Daten zur Temperaturabhängigkeit der Korrosionsraten für unlegierten Stahl in Salzlösung mit Arrhenius-Fit aus /DIE 88/.....	47
Abb. 5.3	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Lösungsmenge (links) und resultierende Lösungsmenge (rechts) im Versatz und in der ALZ.	57
Abb. 5.4	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Lösungsmenge (links) und resultierende Lösungsmenge (rechts) am Behälter	58
Abb. 5.5	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) im Versatz	60
Abb. 5.6	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur Porositätsänderung (links) und resultierende Porosität (rechts) in der ALZ.....	61
Abb. 5.7	Temperaturabhängige Beiträge der beteiligten Prozesse zur H ₂ S-Menge (links) und resultierende H ₂ S-Menge (rechts).....	63
Abb. 5.8	Abgeleitete TUF „Mikrobiell beeinflusste Korrosion“ am Behälter.....	66

Abb. 5.9	Abgeleitete TUF „Korrosion“ am Behälter	67
Abb. 5.10	Abgeleitete TUF „ Korrosion durch H ₂ S“ am Behälter	68
Abb. 5.11	Abgeleitete TUF „Lösungsdruckänderung“.....	68
Abb. 5.12	Abgeleitete TUF „Gasdruckänderung“	69
Abb. 5.13	Abgeleitete TUF „Kompaktion (Kriechbeschleunigung)“ in Versatz und ALZ.....	70
Abb. 5.14	Abgeleitete TUF „Kriechfähigkeit (Steinsalz)“.....	71
Abb. 5.15	Abgeleitete TUF „Thermische Zersetzung“	71
Abb. 5.16	Abgeleitete TUF „Kornbruch“	72
Abb. 5.17	Abgeleitete TUF „Behälterabsinken“	73
Abb. 5.18	Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Lösung)“ im Versatz.....	74
Abb. 5.19	Abgeleitete TUF „ Advektion / Dispersion (Lösung)“ in der ALZ	74
Abb. 5.20	Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ im Versatz.....	75
Abb. 5.21	Abgeleitete TUF „Advektion / Dispersion (Gas)“ in der ALZ	75
Abb. 5.22	Abgeleitete TUF „Diffusion (Lösung)“ im Versatz	76
Abb. 5.23	Abgeleitete TUF „ Diffusion (Lösung)“ in der ALZ.....	76
Abb. 5.24	Abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ im Versatz	77
Abb. 5.25	Abgeleitete TUF „Diffusion (Gas)“ in der ALZ.....	77
Abb. 6.1	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Behälter (rechts)	83
Abb. 6.2	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den Versatz (rechts)	83
Abb. 6.3	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für die ALZ (rechts).....	84
Abb. 6.4	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur integritätsrelevanten GTUF für den ewG (rechts).....	84
Abb. 6.5	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für den Versatz (rechts)	85
Abb. 6.6	Beitragende abgeleitete TUF (links) zur transportrelevanten GTUF für die ALZ (rechts).....	85

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Temperaturbeeinflusste Komponenten und deren Bezeichnungen in /FRE 20/	23
Tab. 5.1	Primäre TUF für das Wirtsgestein Steinsalz.....	35
Tab. 5.2	Bewertung der primären TUF für das Wirtsgestein Steinsalz	52
Tab. 5.3	Identifizierte Bilanzierungsgrößen mit den beitragenden primären TUF	55
Tab. 5.4	Abgeleitete TUF für das Wirtsgestein Steinsalz	64
Tab. 7.1	Günstige Temperaturbereiche für die Integrität der Komponenten im Wirtsgestein Steinsalz	88
Tab. 7.2	Günstige Temperaturbereiche hinsichtlich des Transports von Radionukliden in den Komponenten im Wirtsgestein Steinsalz	88

Abkürzungsverzeichnis

ALZ	Auflockerungszone
BE	Brennelemente
BGE	Bundesgesellschaft für Endlagerung
BGR	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe
DWR-BE	Brennelementen aus Druckwasserreaktoren
ELS	Endlagersystem
ELK	Endlagerkonzept
ESK	Entsorgungskommission
EndSiAnfV	Endlagersicherheitsanforderungsverordnung
EndSiUntV	Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung
ewG	Einschlusswirksamer Gebirgsbereich
FEP	Features, Events and Processes
GBT	Gebirgstemperatur
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH
GTUF	Gesamttemperaturunverträglichkeitsfunktion
IFEP	Internationalen FEP-Liste der OECD/NEA
RN	Radionuklid
StandAG	Standortauswahlgesetz
SWR-BE	Brennelementen aus Siedewasserreaktoren
TUF	Temperaturunverträglichkeitsfunktion
VSG	Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben

**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