

# **SR 97**

## **Processer i förvarets utveckling**

November 1999

**Svensk Kärnbränslehantering AB**

Box 5864

102 40 Stockholm

Tel 08-459 84 00

Fax 08-661 57 19



**Underlagsrapport  
till SR 97**

# **SR 97**

## **Processer i förvarets utveckling**

Svensk Kärnbränslehantering AB

November 1999

# Förord

Denna rapport beskriver samlat och på ett enhetligt format alla kända inre processer av betydelse för utveckling och säkerhet efter förslutning hos ett KBS-3-förvar för använt kärnbränsle.

Rapporten är färdigställd för att kunna användas inom projekt SR 97 vilket begränsat den tillgängliga tiden för bearbetning. Skillnader i detaljeringsnivå i beskrivningar av olika processer återspeglar inte alltid skillnader i processernas signifikans. Diskussioner om olika typer av osäkerheter kan i många fall utvidgas och fördjupas och den stilistiska kvaliteten kan ibland förbättras.

Liksom annat underlag till säkerhetsanalyserna förväntas processrapporten behöva vidareutvecklas också i takt med att platsspecifika data tillkommer.

Dagens version av processrapporten är därför en första version av en rapport som kommer att revideras inför varje säkerhetsredovisning. Avsikten är att genomföra en första revision av rapporten efter granskning av SR 97. Då kommer också materialet att länkas till SKB:s s k FEP-databas.

Många författare inom och utom SKB har bidragit till denna version:

**Processer i bränsle och kapsel, kapitel 2 och 3:** Lars Werme, SKB.

**Processer i buffert/återfyllning, kapitel 4:** Harald Hökmark, Clay Technology (termiska processer); Lennart Börgesson, Clay Technology (hydrauliska och mekaniska processer); Ola Karnland, Clay Technology (kemiska processer) samt Patrik Sellin, SKB (radionuklidtransport). Även Roland Pusch, Geodevelopment AB, har bidragit till buffertdelen.

**Processer i geosfären, kapitel 5:** Harald Hökmark, Clay Technology (T, M); Ingvar Rhén, VBB Viak (H); Peter Wikberg och Jan-Olof Selroos, SKB (C respektive radionuklidtransport).

Dessutom har Karsten Pedersen, institutionen för marin mikrobiologi vid Göteborgs universitet, bidragit med material om bakteriella processer i buffert och geosfär.

Tillsammans med respektive författare har materialet diskuterats i en grupp bestående av Johan Andersson, Golder Grundteknik, Patrik Sellin, SKB (processer i bränsle, kapsel och buffert/återfyllning), Jan-Olof Selroos, SKB (processer i geosfär) samt undertecknad.

Kristina Skagius, Kemakta Konsult AB, har stämt av innehållet i rapporten mot dokumentationen av de interaktionsmatriser som använts för att välja processerna.

Undertecknad svarar för formatet för processbeskrivningarna, samt för bearbetning och redigering av texten. Karin Pers, Kemakta Konsult AB, assisterade vid slutskedet av redigeringen.

Ett varmt tack riktas till alla som bidragit med material och därefter, oftast tålmodigt, besvarat otaliga frågor och tillmötesgått ibland omfattande önskemål om omarbetningar.

SKB svarar för material och slutsatser i rapporten.

Stockholm i oktober 1999

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Allan Hedin'. The signature is fluid and cursive, with a long horizontal stroke at the end.

Allan Hedin



# Innehåll

	<b>Sida</b>
<b>1 Inledning</b>	9
1.1 Referenser	10
<b>2 Bränsle/hålrums i kapsel</b>	11
2.1 Beskrivning av bränsle/hålrums	11
2.1.1 Allmänt	11
2.1.2 Överblick av variabler	12
2.1.3 Detaljerad beskrivning av bränslets struktur och radionuklidernas fördelning i strukturen	13
2.2 Översikt av processer	18
2.3 Strålrelaterade processer	20
2.3.1 Radioaktivt sönderfall	20
2.3.2 Stråldämpning/värmealstring	21
2.3.3 Inducerad fission (kriticitet)	23
2.4 Termiska processer	24
2.4.1 Värmetransport	24
2.5 Hydrauliska processer	26
2.5.1 Vatten- och gastransport i kapselns hålrum, kokning/kondensation	26
2.6 Mekaniska processer	29
2.6.1 Termisk expansion/kapslingsbrott	29
2.7 Kemiska processer	30
2.7.1 Advektion och diffusion	30
2.7.2 Restgasradiolys/syrabildning	30
2.7.3 Vattenradiolys	32
2.7.4 Metallkorrosion	33
2.7.5 Bränsleupplösning	36
2.7.6 Lösning av gapinventarium	39
2.7.7 Speciering av järnkorrosionsprodukter	40
2.7.8 Speciering av radionuklider, kolloidbildning	42
2.7.9 Heliumproduktion	48
2.8 Radionuklidtransport	49
2.9 Referenser	52
<b>3 Gjutjärnsinsats/kopparkapsel</b>	57
3.1 Beskrivning av gjutjärnsinsats och kopparkapsel	57
3.1.1 Allmänt	57
3.1.2 Överblick av variabler	58
3.2 Översikt av processer	58
3.3 Strålrelaterade processer	60
3.3.1 Stråldämpning/värmealstring	60
3.4 Termiska processer	61
3.4.1 Värmetransport	61
3.5 Hydrauliska processer	63
3.6 Mekaniska processer	63
3.6.1 Inledning	63
3.6.2 Deformation gjutjärnsinsats	64
3.6.3 Deformation av kopparkapsel från yttre övertryck	64
3.6.4 Termisk expansion (såväl gjutjärnsinsats som kopparkapsel)	69
3.6.5 Deformation från inre korrosionsprodukter	70

3.7	Kemiska processer	72
3.7.1	Korrosion gjutjärnsinsats	72
3.7.2	Galvanisk korrosion	75
3.7.3	Spänningskorrosion gjutjärnsinsats	77
3.7.4	Strålpåverkan	78
3.7.5	Korrosion kopparkapsel	80
3.7.6	Spänningskorrosion kopparkapsel	84
3.8	Radionuklidtransport	85
3.9	Referenser	86
<b>4</b>	<b>Buffert/återfyllning</b>	<b>89</b>
4.1	Beskrivning av buffert och återfyllning	89
4.1.1	Allmänt	89
4.1.2	Överblick av variabler	90
4.2	Översikt av processer	91
4.3	Strårelaterade processer	93
4.3.1	Stråldämpning/värmealstring	93
4.4	Termiska processer	95
4.4.1	Värmetransport	95
4.5	Hydrauliska processer	99
4.5.1	Vattentransport vid omättade förhållanden	99
4.5.2	Vattentransport vid mättade förhållanden	104
4.5.3	Gastransport/gaslösning	107
4.6	Mekaniska processer	111
4.6.1	Svällning	111
4.6.2	Mekanisk växelverkan buffert/återfyllning	116
4.6.3	Mekanisk växelverkan buffert/kapsel	118
4.6.4	Mekanisk växelverkan buffert/närfältberg	121
4.6.5	Mekanisk växelverkan återfyllning/närfältberg	122
4.6.6	Termisk expansion	124
4.7	Kemiska processer	126
4.7.1	Inledning, cementering	126
4.7.2	Advektion	126
4.7.3	Diffusion	128
4.7.4	Jonbyte/sorption	129
4.7.5	Montmorillonitomvandling	132
4.7.6	Lösning/fällning föroreningar	138
4.7.7	Kolloidfrigörelse/erosion	141
4.7.8	Strålinducerad montmorillonitomvandling	144
4.7.9	Radiolys av porvatten	145
4.7.10	Mikrobiella processer	146
4.8	Radionuklidtransport	148
4.8.1	Överblick	149
4.8.2	Advektion	149
4.8.3	Kolloidtransport	149
4.8.4	Speciering av radionuklider	150
4.8.5	Sorption	150
4.8.6	Diffusion	152
4.8.7	Sönderfall	155
4.9	Referenser	156

<b>5</b>	<b>Geosfären</b>	163
5.1	Beskrivning av geosfären	163
	5.1.1 Allmänt	163
	5.1.2 Överblick av variabler	163
5.2	Översikt av processer	164
5.3	Strålrelaterade processer	166
5.4	Termiska processer	166
	5.4.1 Värmetransport	166
5.5	Hydrauliska processer	171
	5.5.1 Grundvattenströmning	171
	5.5.2 Gasströmning/gaslösning	182
5.6	Mekaniska processer	184
	5.6.1 Inledning	184
	5.6.2 Rörelse i intakt berg	190
	5.6.3 Termisk rörelse	192
	5.6.4 Reaktivering – rörelse längs befintliga sprickor	194
	5.6.5 Sprickbildning	203
	5.6.6 Tidsberoende deformationer	207
5.7	Kemiska processer	210
	5.7.1 Inledning	210
	5.7.2 Advektion/blandning	213
	5.7.3 Diffusion	219
	5.7.4 Reaktionen grundvatten/bergmatris	221
	5.7.5 Lösning/fällning sprickmineraler	224
	5.7.6 Mikrobiella processer	228
	5.7.7 Nedbrytning av oorganiskt konstruktionsmaterial	231
	5.7.8 Kolloidsättning	232
	5.7.9 Gasbildning/gaslösning	234
	5.7.10 Metanisomsättning	236
	5.7.11 Saltutfrysning	237
5.8	Radionuklidtransport	238
	5.8.1 Advektion och dispersion	238
	5.8.2 Sorption	241
	5.8.3 Molekylär diffusion samt matrisdiffusion	243
	5.8.4 Kolloidtransport	246
	5.8.5 Speciering	247
	5.8.6 Transport i gasfas	248
	5.8.7 Sönderfall	249
5.9	Referenser	250

# 1 Inledning

Denna rapport beskriver de inre processer som över tiden leder till förändringar i ett KBS 3 förvar för använt kärnbränsle. Texten är en första version, avsedd för säkerhetsanalysen SR 97. Sammanhanget för materialet i rapporten framgår av kapitel 4 i SR 97 Huvudrapport och innebär i korthet följande:

Förvaret har i SR 97 delats in i de fyra systemdelarna bränsle/hållrum, gjutjärnsinsats/kopparkapsel, buffert/återfyllning samt geosfär. Inom varje systemdel har ett antal processer av betydelse för utvecklingen efter förslutning identifierats. Detta har gjorts med hjälp av materialet i de sk interaktionsmatriser som tidigare utvecklats av SKB /se t ex Skagius et al, 1995/. Processerna har delats in i kategorierna termiska, hydrauliska, mekaniska och kemiska. Dessutom förekommer processer relaterade till strålning och radionuklidtransport. Kopplingen mellan materialet i interaktionsmatriserna och denna rapport beskrivs i /Pers et al, 1999/

I denna rapport dokumenteras de identifierade processerna. Varje systemdel har sitt eget kapitel och varje kapitel är uppdelat i strålrelaterade, termiska, hydrauliska, mekaniska och kemiska processer samt radionuklidtransport. Kapitlen inleds med en beskrivning av respektive systemdel samt en överblick av de processer som ska behandlas.

Alla processer beskrivs därefter på ett enhetligt format med följande underrubriker:

## **Överblick**

Kort beskrivning av processen, vad den påverkas av och påverkar samt dess betydelse för säkerheten.

## **Allmän beskrivning**

Mer detaljerad beskrivning av processen och mekanismerna som är inblandade.

## **Modellstudier/experimentella studier**

Beskrivning av modellstudier och/eller experimentella studier som gjorts för att kvantifiera processen.

## **Tidsperspektiv**

Om möjligt att ange: I vilken tidsskala leder processen till relevanta förändringar? Ibland kan flera tidsperspektiv behöva anges.

## **Naturliga analogier**

Om relevant.

## **Sammanfattning av osäkerheter**

Här diskuteras osäkerheter i förståelse (konceptuell osäkerhet) och dataosäkerhet.

## **Hantering i säkerhetsanalysen**

Här beskrivs hur processen kan hanteras i säkerhetsanalysen för fyra viktiga scenarier som analyseras i SR 97.

### **1.1 Referenser**

**Pers K, Skagius K, Södergren S, Wiborgh M, Bruno J, Pusch R, Hedin A, Morén L, Sellin P, Ström A.** SR 97 – Identification and structuring of processes. SKB TR-99-20, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Skagius K, Ström A, Wiborgh M, 1995.** The use of interaction matrices for identification, structuring and ranking of FEPs in a repository system. Application on the far-field of a deep geological repository for spent fuel. SKB TR 95-22, Svensk Kärnbränslehantering AB.

## 2 Bränsle/hålrums i kapsel

### 2.1 Beskrivning av bränsle/hålrums

#### 2.1.1 Allmänt

##### **Bränsletyper**

Flera sorters bränsle ska deponeras i förvaret. För ett alternativ med 25 års reaktordrift uppskattas mängden BWR-bränsle till ungefär 5000 ton och mängden PWR-bränsle till ungefär 1500 ton /PLAN 98/. Utöver detta kommer det att deponeras 23 ton MOX-bränsle och 20 ton bränsle från reaktorn i Ågesta.

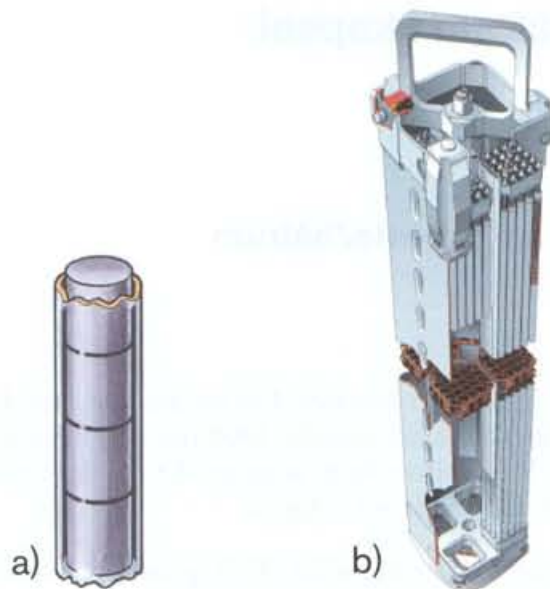
I SR 97 antas i de flesta delanalyser förenklat alla kapslar innehålla BWR-bränsle av typ SVEA 96 med en utbränningsgrad av 38 MWd/tU.

PWR-bränsle skiljer sig marginellt från BWR-bränsle när det gäller innehåll av radionuklider. Andra aspekter av betydelse i säkerhetsanalysen, t ex bränslekapslingsrörens geometri, hanteras i regel så pessimistiskt i analyser av radionuklidtransport att skillnader mellan olika bränsletyper blir irrelevanta. Skillnaden mellan MOX-bränsle och uranbränsle finns diskuterad i /Forsström, 1982/. MOX-bränslet har högre resteffekt än uranbränsle, vilket gör att mindre bränsle kan deponeras i varje kapsel.

För kriticitetsbedömningar blir skillnader mellan olika bränsletyper viktigare. I SR 97 behandlas BWR-bränslet av typ SVEA-64 och PWR-bränsle av typ FA17x17 eftersom dessa typer är mest ogynnsamma i kriticitetshänseende.

##### **Bränsleelementens uppbyggnad**

Kärnbränsle består av cylindriska kutsar av urandioxid. Kutsarna är 11 mm höga och har en diameter av 8 mm. I bränsle av typen SVEA 96 ligger kutsarna staplade i cirka 4 meter långa kapslingsrör av Zirkaloy, en beständig zirkoniumlegering. Rören är förslutna med svetsar och hopmonterade till bränsleelement. Varje element innehåller 96 kapslingsrör. Ett bränsleelement innehåller dessutom box, handtag, spridare m m. Dessa består av Inconel och Incoloy, som är nickellegeringar samt av rostfritt stål.



**Figur 2-1.**

- a. Cylindriska bränslekutsar i kapslingsrör av Zirkaloy. Kutsarna har en diameter av cirka en centimeter.
- b. Bränsleelement av typ SVEA 96. Elementet består av 96 bränslerör och har en höjd av cirka 4 meter.

### **Radionuklider**

Radionuklider bildas under reaktordriften genom klyvning av kärnor av framför allt uran-235 och plutonium-239 samt genom att neutroner infångas av kärnor i bränslets metalldelar. De förra kallas *fissionsprodukter*, de senare *aktiveringsprodukter*. Dessutom kan uran bilda plutonium och andra tyngre element genom att ta upp en eller flera neutroner. Dessa m fl element (inklusive uran) kallas *aktinider* och sönderfaller till radioaktiva *aktiniddöttrar* i flera steg för att till slut bilda stabila former av metallerna bly eller vismut.

Huvuddelen av radionukliderna ligger inbäddade i bränslematrisen av urandioxid. Några få fissionsprodukter är relativt lätttrörliga i bränslet och kan vandra till bränslekutsarnas yta under driften. Fördelningen av radionuklider i bränslet diskuteras utförligt i avsnitt 2.1.3.

### **2.1.2 Överblick av variabler**

För säkerhetsanalysen beskrivs bränslet med hjälp av en uppsättning variabler som tillsammans karakteriserar bränslet på ett lämpligt sätt för analysen. Beskrivningen gäller inte bara själva bränslet utan även hålrummen i kapseln, dit vatten kan tränga in vid en skada på kopparkapseln. I hålrummet kommer då processer som bränsleupplösning och korrosion av gjutjärnsinsatsen att äga rum. Hålrummet skulle alltså kunna ingå i endera systemdelen bränsle eller kapsel och har här inkluderats i bränslet.

Bränslet karakteriseras strålningsmässigt av **strålintensiteten** av  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ - och neutronstrålning och termiskt av **temperaturen**. Hydrauliskt är det intressant att karakterisera hålrummet om kopparkapseln skulle skadas och vatten tränga in. Hydrauliskt karakteriseras hålrummet av vattenflöden och vattentryck samt av gasflöden och gstryck, som tillsammans benämns **hydrovariabler** i systembeskrivningen. Mekanisk karakteriseras bränslet av **spänningar** i materialen. Kemiskt karakteriseras bränslet av **materialsammansättningen** i bränslematrisen. Om vatten tränger in ingår också **vattensammansättning** och **gassammansättningen** i den kemiska beskrivningen.

Variablerna definieras i tabell 2-1.

**Tabell 2-1. Variabler i bränsle/hålrum.**

<b>Geometri</b>	Geometriska mått för bränsleelementets samtliga komponenter, som bränslekutsar och Zirkaloykapsling. Även bränslekutsarnas detaljerade geometri inklusive sprickighet ingår.
<b>Strålintensitet</b>	Intensitet av $\alpha$ -, $\beta$ -, $\gamma$ - och neutronstrålning som funktion av tid och rum i bränsleelementet.
<b>Temperatur</b>	Temperatur som funktion av tid och rum i bränsleelementet.
<b>Hydrovariabler</b>	Flöden och tryck för vatten och gas som funktion av tid och rum i bränslets och kapselns hålrum.
<b>Mekaniska spänningar</b>	Mekaniska spänningar som funktion av tid och rum i bränsleelementet.
<b>Radionuklidinventarium</b>	Förekomsten av radionuklider som funktion av tid och rum i bränsleelementets olika delar. Här beskrivs också hur radionuklider i kutsarna fördelas mellan matris och yta.
<b>Material-sammansättning</b>	De material som bränsleelementets olika delar består av, <i>exklusive radionuklider</i> .
<b>Vatten-sammansättning</b>	Sammansättning av vatten (inklusive eventuella radionuklider och lösta gaser) i bränslets och kapselns hålrum.
<b>Gas-sammansättning</b>	Sammansättning av gas (inklusive eventuella radionuklider) i bränslets och kapselns hålrum.

### 2.1.3 Detaljerad beskrivning av bränslets struktur och radionuklidernas fördelning i strukturen

Kärnbränslet består av centimeterstora cylindriska kutsar av sintrad, keramisk urandioxid. Kutsarna är staplade i kapslingsrör till bränslestavar, som i sin tur är ihopmonterade till bränsleelement. Bränsleelementen för en svensk BWR-reaktor består av 64 till 100 stavar, ordnade kvadratisk som 8x8 eller 10x10 stavar. Dessa är i sin tur omslutna av en fyrkantig bränslekanal med en tvärsnittsarea av ungefär 14x14 cm. Den totala längden för ett BWR element kan vara upp till 4,4 m. Längden på kolonnen av kärnbränsle är ungefär 3,7 m. Bland det svenska BWR-avfallet finns dessutom små mängder MOX-bränsle och bränsle från den nedlagda Ågestareaktorn.

För PWR-bränsle är antalet bränslestavar i ett bränsleelement 15x15 eller 17x17, vilket ger en tvärsnittsarea på 21,4x21,4 cm. PWR bränsleelementet saknar bränslekanal och är också någon decimeter kortare än BWR elementet.



Huvuddelen av radioaktiviteten i bränsleelementet finns i eller på urandioxiden; mindre mängder finns även i kapslingsrören och övriga metalldelar som aktiveringsprodukter. Kapslingsrören till bränslet består av Zirkaloy. Övriga strukturelement i bränslet består av rostfritt stål, Inconel, Incoloy eller Zirkaloy.

### **Bränslet**

Kärnbränslet består av mycket nära stökiometrisk urandioxid i form av cylindriska kutsar med cirka 1 cm diameter och cirka 1 cm längd. Kornstorleken är vanligen några mikrometer. Uranet i bränslet har anrikats på isotopen  $^{235}\text{U}$  från den naturligt förekommande halten 0,7 procent upp till 3,6 procent för BWR bränsle (4,2 procent för gadoliniumhaltigt bränsle) och 4,2 procent för PWR bränsle.

Bränslet utvecklar under drift typiskt en effekt av 15 till 25 kW per meter bränslepinne, vilket motsvarar en centrumtemperatur i bränslekutsen i intervallet 800 °C till 1200 °C. Efter användning i reaktorn innehåller bränslet 3–5 procent klyvningsprodukter beroende på utbränningen och cirka 1 procent högre aktinider som bildats genom neutroninfångning och radioaktivt sönderfall. Den genomsnittliga utbränningen för svenskt kärnbränsle är för närvarande (1998) 40 MWd/kg U, men medelutbränningen har gradvis ökat och kan för nyare bränsle komma att ligga i intervallet 50–60 MWd/kg U.

Huvuddelen av klyvningsprodukterna och de högre aktiniderna finns som fast lösning i urandioxidmatrisen. Förutom den kemiska förändring av urandioxiden detta innebär, har bränslet även påverkats fysiskt vid driften i reaktorn.

### **Bränslekutsarnas geometri**

Under drift spricker de ursprungligen cylindriska bränslekutsarna med en ytförstoring som följd. Omfattningen av denna ytförstoring, som kan vara av betydelse om bränslet kommer i kontakt med vatten i ett djupförvar, är ofullständigt känd. Geometriska uppskattningar ligger i storleksordningen några kvadratcentimeter per gram bränsle. Johnson /1982/ uppskattar arean till 2 cm<sup>2</sup>/g. Gray et al /1992/ kommer till i stort sett samma resultat (2,1 cm<sup>2</sup>/g) för bränslepartiklar i storleksområdet 0,5 till 5 mm, men ansätter efter att ha tagit hänsyn till ytojämnheter och porositet ett värde på 6,4 cm<sup>2</sup>/g. För bränslepartiklar i storleksområdet 700 till 1700 µm bestämmer Gray et al /1993/ en area på 17 cm<sup>2</sup>/g, motsvarande även här den geometriska multiplicerad med en faktor 3 för att ta hänsyn till ytojämnheter. Detta stämmer väl överens med areor mätta på obestrålat bränsle i ett liknande storleksområde (900–1100 µm) med gasadsorption (Braunauer-Emmett-Teller metoden, BET-metoden), där Torrero /1995/; Casas et al /1993/ bestämde arean till 16 cm<sup>2</sup>/g. För en hel bränslekuts rapporterar Torrero en BET-area på 1,9 cm<sup>2</sup>/g. För båda dessa storleksområden på bränsle motsvarar BET-arean tre gånger den geometriska arean<sup>1</sup>.

En mätserie är känd, där man försökt mäta area på använt bränsle med BET-metoden /Lundström et al, 1997/. Resultaten låg i intervallet 59 till 121 cm<sup>2</sup>/g med ett medelvärde på cirka 80 cm<sup>2</sup>/g. För oanvänt bränsle uppmättes areor i samma storleksordning, att jämföras med Torreros betydligt mindre värden för motsvarande storleksområden. Det är osäkert om dessa areor är representativa för den bränslearea över vilken oxidation/upplösningen skulle ske om bränslet kom i kontakt med vatten.

<sup>1</sup> Det bör noteras att Casas et al beräknar geometriska arean genom att anta att bränslepartiklarna kan betraktas som sfärer, medan Gray et al /1993/ betraktar dem som kuber. Detta ger en skillnad på ungefär en faktor två för uppskattad geometrisk area.

Resultat från BET-metoden måste också betraktas kritiskt. Mätningen, som oftast ger reproducerbara resultat, ger mått på den area på vilken en inert gas adsorberar och ger också goda relativa mått på areorna av olika material i samma storleksfraktioner. Det kan emellertid inte utan vidare antas att den ger ett mått på den väta arean på använt bränsle i kontakt med vatten. Sannolikt överskattar metoden den area på provet, som är i kontakt med vatten. Dessutom kan värmeutvecklingen och den joniserande strålningen i använt bränslet påverka areabestämningen. Gray et al /1994/ konstaterar också att någon form av geometrisk area troligen är lämpligare än en BET area att använda för bränsle.

Porositeten och kornstorleken i bränslet kan ha betydelse för bränslets specifika area. Dessa varierar över ett brett område beroende på faktorer som tillverkning, utbränning och bestrålningshistoria, men varierar också längs radien inom samma bränslekuts.

### **Anrikning på kutsarnas yta**

För bränsle som bestråls vid relativt låg temperatur är den radiella variationen i kornstorlek och porositet liten med måttlig korntillväxt i bränslekutsens centrum. Ett undantag från detta är den kraftiga ökningen i porositet i bränslekutsens periferi. Över ett område på några mikrometers djup ytterst på kutsen är porositeten flera gånger högre än inne i bränslet. Denna zon avviker också vad gäller mikrostrukturen från kutsen i övrigt genom att de ursprungliga kornen "delats" i en mängd mindre korn. Orsaken till detta ligger i lokala variationer i fissionsraterna över bränslets diameter.

Självskärmning i bränslet leder till förhöjd bildning och fission av plutoniumisotoper, ökad bildning av andra aktinider samt ökad frekvens av  $^{235}\text{U}$  fissioner i det yttersta skiktet på bränslekutsen. Resultatet blir en kraftig ökning i både utbränning och alfaaktivitet på bränslekutsarnas periferi. Med den ökade utbränningen följer också ett högre innehåll av klyvningsprodukter. Vid en medelutbränning på cirka 40 MWd/kg U kan ytskiktet ha upp till dubbla utbränningen och även en mer än fördubblad alfaaktivitet /Forsyth, 1995/.

### **Radionuklider i gapet mellan bränsle och kapslingsrör**

En del klyvningsprodukter är gasformiga vid de temperaturer bränslet haft under drift. Detta gäller ädelgaserna krypton och xenon men kan även gälla lättflyktiga klyvningsprodukter som cesium och jod. En andel av dessa klyvningsprodukter kan under bestrålningen lämna bränslematrisen och vandra till de tomrymmen som finns mellan bränsle och kapsling. Huvuddelen av bränslet har en fissionsgasfrigörelse på under 1 procent, men det maximala värdet kan ligga på tiotals procent /Johnson och Tait, 1997/. Det antas allmänt att frigörelsen av cesium och jod är av samma storlek som fissionsgasfrigörelsen. Detta har visats för CANDU bränsle /Stroes-Gascoyne et al, 1987/. Det är inte fastställt att samma korrelation gäller för lättvattenreaktorbränsle, även om resultaten från SKB:s bränslestudier, tycks stödja detta för Cs (BWR, 42 MWd/kg U: fissionsgasfrigörelse 0,7 procent, Cs-frigörelse ca. 1 procent, PWR, 43 MWd/kg U: fissionsgasfrigörelse 1,05 procent, Cs-frigörelse cirka 1 procent /Forsyth och Werme, 1992/). Resultat från bränsle med hög fissionsgasfrigörelse (upp till 18 procent) visar emellertid på en cesiumfrigörelse, som endast motsvarar en fjärdedel av fissionsgasfrigörelsen /Gray et al, 1992/. Liknande observationer har Gray /1998/ gjort för jod.

Det är stora osäkerheter kring andelen klyvningsprodukter, som kan ha frigjorts från bränslematrisen under drift i reaktorn. Bränslets bestrålningshistoria är av stor betydelse och utvecklingen går mot högre utbränning och även högre effektuttag ur bränslestavarna. Barner et al /1993/ visar att för utbränningar lägre än 20 MWd/kg U är fissionsgasfrigörelsen mindre än 1 procent och för huvuddelen av bränsle med högre utbränning är fissionsgasfrigörelsen mindre än cirka 5 procent. Undersökningar av Koizumi et al /1991/ tyder på att fissionsgasfrigörelsen beror mer av den maximala linjära effekttätheten än av utbränningen.

Modeller har utvecklats för beräkning av viktiga bränsleparametrar, som uppbyggnad av inre gastryck och fissionsgasfrigörelse /Forsberg et al, 1996/.

Modellerna användes för beräkningar av fissionsgasfrigörelsen i BWR SVEA-64 bränsle och resultaten visade att vid 100 procent effektuttag var maximala fissionsgasfrigörelsen nära 20 procent och vid 106 procent effektuttag över 23 procent; medianvärdet var 2 procent respektive 1 procent baserat på information från Massih /1997/. Medelvärdet för fissionsgasfrigörelsen var 4,5 procent respektive 2,5 procent. 95 procent av alla stavar har en fissionsgasfrigörelse på mindre än 14 procent respektive 8 procent för de två fallen. Maximala fissionsgasfrigörelsen kan ligga på tiotals procent, men bara för en obetydlig del av härden motsvarande 0,001 procent till 0,01 procent av allt bränsle.

Hallstadius och Grapengiesser /1991/ har gjort en analys av fissionsgasfrigörelsen för ett antal 8x8 ABB bränslestavar och fann att fissionsgasfrigörelsen var beroende av bränsleelementens position i härden i relation till styrstavarna med högsta värden från 8 procent till över 20 procent. Huvuddelen av de analyserade bränsleelementen hade en fissionsgasfrigörelsen på under 5 procent även vid så höga utbränningar som 50 MWd/kgU. Det uppskattade medelvärdet för Hallstadius och Grapengiessers data är ungefär 3,5 procent.

Schrire et al /1997/ mätte fissionsgasfrigörelsen för över 100 10x10 SVEA bränsleelement med utbränning på upp till 50 MWd/kgU. Fissionsgasfrigörelsen var maximalt 5 procent trots att man valt element, som erfarenhetsmässigt har hög fissionsgasfrigörelse. Det uppskattade medelvärdet för fissionsgasfrigörelsen var 1 procent.

Variationerna mellan olika bränslestavar är alltså stor och detta leder till stora osäkerheter för fissionsgasfrigörelsen. Eftersom modelleringar visar att mer än 50 procent av stavarna, även vid extrema förhållanden, som har en frigörelse under 2 procent och nyligen genomförda undersökningar /Schrire et al, 1997/ ger ett medelvärde på 1 procent för modernt bränsle, kan det vara rimligt att välja 2 procent som referensvärde.

Även om inga systematiska undersökningar av korrelationer mellan frigörelsen av fissionsgaser och vattenlösliga klyvningsprodukter gjorts för lättvattenreaktorbränsle, kan det vara pessimistiskt att använda kanadensiska data för CANDU bränsle /Stroes-Gascoyne, 1996/. Det är troligen mycket pessimistiskt för huvuddelen av det nuvarande bränsleinventariet, men trenden med bestrålning med högre linjär topp effekt ökar tendensen till utskiljningar av klyvningsprodukter till gapet och skulle leda till att skillnaderna mellan lättvattenbränsle och CANDU bränsle minskar. Detta innebär att 2 procent av andelen cesium och jod pessimistiskt kan antas finnas i gapet mellan bränsle och kapsling för svenskt lättvattenbränsle.

### **Radionuklider vid korngränser; utskiljningar**

Utöver frigörelsen av gasformiga klyvningsprodukter utskiljs också fasta grundämnen som är oförenliga med urandioxidens struktur och bildar separata faser. I lättvattenreaktorbränsle finns inneslutningar av metallegeringar av Mo-Tc-Ru-Rh-Pd (4-d metaller), även kallade  $\epsilon$ -Ru faser. I normalt bränsle kan man se dessa partiklar med storleken 0,5 till 1  $\mu\text{m}$ , motsvarande upplösningen för optiska mikroskop /Forsyth, 1995; Forsyth, 1996/. Andelen 4-d metaller som Forsyth kunde bestämma med optisk mikroskopi motsvarade mindre än 2 procent av deras totala inventarium i bränslet. Med elektronmikroskopi har man kunnat konstatera att  $\epsilon$ -Ru faser även förekommer i storleksintervallet 1 till 100 nm /Thomas och Guenther, 1989/. När bränsle löses upp i salpetersyra bildar 4-d metallerna en olöslig rest. Genom att analysera dessa upplösningrester har Forsyth kunnat konstatera att åtminstone 80 procent av inventariet förelåg som sfäriska inneslutningar i storleksområdet 0,1 till 0,5  $\mu\text{m}$ .

Utöver dessa kända utskiljningar i bestrålat bränsle har möjligheterna att vissa fissionsprodukter utskiljts till korngränserna i urandioxiden diskuterats. För CANDU bränsle, som bestrålas med högre linjär effekttäthet (20–55 kW/m) än lättvattenbränsle, har man med fotoelektronpektroskopi fastställt att cesium, rubidium, tellur och barium finns i korngränserna, ofta med höga ytanrikningar /Hocking et al, 1994/. Gray et al /1992/ bestämde korngränsinventariet av cesium till mindre än 1 procent. För teknetium och strontium låg värdena för gap och korngränsinventarier nära detektionsgränserna och befanns vara mindre än 0,2 procent av det totala inventariet. En undersökning av korngränser med Augerspektroskopi av Thomas et al /1988/ på bränslen med måttlig utbränning och låg fissionsgasfrigörelse visade ingen detekterbar mängd cesium, strontium och teknetium. På ett PWR bränsle med hög fissionsgasfrigörelse (18 procent; motsvarande bränsle ingick också i Grays et al studie /1992/) fann Thomas et al,  $\epsilon$ -faser med höga ytkoncentrationer av cesium, tellur och palladium. Observationen tolkades så att cesium och andra klyvningsprodukter i första hand är förbundna med  $\epsilon$ -faserna och därigenom indirekt med de korngränser som innehåller dessa. Eftersom inga detekterbara mängder cesium, strontium och teknetium kunde påvisas i korngränserna, drog Thomas et al, slutsatsen att korngränsinventariet är litet och därför knappast kan betraktas som en källa för frigörelse av dessa ämnen från bränslet.

Frågan om strontiumutskiljningar och skillnaderna mellan strontium- och uranfrigörelsen från utbränt bränsle i experiment vid Studsvik har diskuterats mycket: Werme och Forsyth /1988/ framför hypotesen att huvuddelen av det strontium, som frigörs kommer från selektiv lakning av sprickor och korngränser. Försök har gjorts att bestämma korngränsinventarier med mikrosondanalys i ett bränsle med utbränningen 37 MWd/kg U (linjär effekttäthet < 20 kW/m), som utsatts för en kontrollerad effekttökning till 43 kW/m i Studsviks R2 reaktor /Forsyth et al, 1988/. Staven hade en påtaglig frigörelse av krypton och xenon, och även omfördelning av cesium till gapet mellan kapslingsrör och bränslekuts under effekthöjningen. Kraftiga koncentrationsgradienter inom de individuella kornen kunde observeras för xenon och cesium, men inte för neodym. För strontium var halterna alltför nära detektionsgränsen för att ge pålitliga data. I ett senare korrosionsexperiment med ett bränsle med utbränningen 44–48 kWd/kg U (linjär effekttäthet < 15 kW/m), genomfördes en liknande effekthöjning till maximalt 43 kW/m /Forsyth et al, 1994/. En signifikant ökning av cesium och rubidiumfrigörelsen kunde observeras och en viss effekt även för barium och teknetium och möjligen också för molybden. Ingen signifikant omfördelning av strontium kunde konstateras.

Tillgängliga data tyder alltså på att lättvattenreaktorbränsle, bestrålat med måttliga effekttätheter, till skillnad från CANDU-bränsle har högst några tiondels procent av inventariet av radionuklider i korngränserna. Bortsett från  $\epsilon$ -Ru faserna finns det troligen inga utskiljningar i bränslet som skulle ha någon betydelse. Korngränsinventariet är inom felgränserna lika med eller nära noll. Ett eventuellt bidrag från korngränserna kommer att vara litet jämfört med inventariet i gapet och kan modelleras med en mindre ökning av förväntat gapinventarium för bränslet. En viss osäkerhet kommer på samma sätt som för gapinventariet från trenden med bestrålning med högre linjär topp-effekt. Pessimistiskt kan ett korngränsinventariet sättas lika med vad som bestämts för CANDU bränsle /Stroes-Gascoyne, 1996/ och vad som diskuteras av Johnson och Tait /1997/.

## 2.2 Översikt av processer

En rad processer kommer över tiden att förändra tillståndet i bränslet och i kapselns hålrum. Vissa sker under alla förhållanden medan andra bara förekommer om kopparkapselns isolering bryts och vatten tränger in i kapseln.

Radionukliderna i bränslet kommer med tiden att omvandlas till icke radioaktiva ämnen genom *radioaktivt sönderfall*. Processen ger upphov till  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ - och neutronstrålning som genom växelverkan med själva bränslet och med omgivande material *dämpas* och omvandlas till värmeenergi. Genom *värmetransport* i form av värmeledning och värme-strålning ändras temperaturen i bränslet och värme förs bort till omgivningen. Temperaturförändringen kommer bland annat att medföra en viss *termisk expansion* av bränslets beståndsdelar. Detta kan, i kombination med den *heliumbildning* som  $\alpha$ -strålningen ger upphov till, leda till *mekaniska brott på kapslingsrör* i bränslet.

I en intakt kopparkapsel kommer *radiolys av restgaser* i hålrummet att leda till bildning av små mängder korrosiva gaser som skulle kunna bidra till spänningskorrosion av gjutjärnsinsatsen.

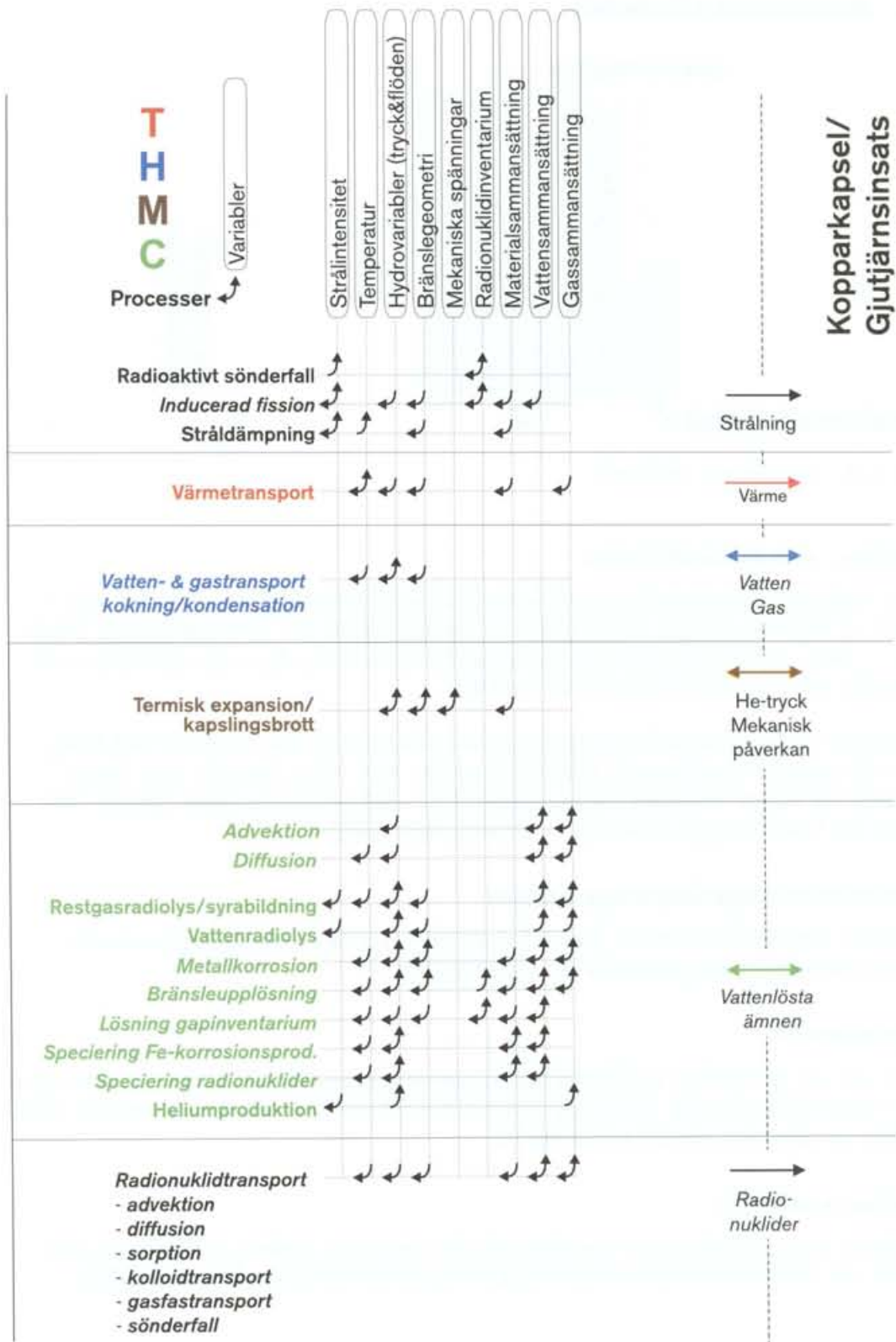
Om koppar kapseln penetreras kan *vatten transporteras* in i kapselns hålrum. Den kemiska miljön förändras därigenom radikalt. Genom *radiolys* av vattnet i hålrummet kommer den kemiska miljön att förändras ytterligare. Vattnet i kapseln orsakar *korrosion av kapslingsrör och övriga metalldelar* i bränslet. Om kapslingsrörens isolering skulle vara bruten initialt eller komma att brytas genom korrosion eller mekaniska påfrestningar kommer bränslet i kontakt med vatten. Detta leder dels till upplösning av radionuklider som samlats på bränselematrisens yta, dels till *upplösning eller omvandling av bränselematrisen* och frigörande av radionuklider. Radionukliderna kan antingen lösas i vattnet och bli tillgängliga för uttransport eller falla ut i fasta faser i kapselns tomrum. Detta bestäms av den *kemiska specieringen av radionuklider* i kapselns hålrum. Vid bränseleupplösningen kan också mikroskopiska partiklar, kolloider, med radionuklider bildas.

Vattenlösta radionuklider kan transporteras med rörligt vatten i kapseln, *advektion*, eller genom *diffusion* i stillastående vatten. Bränselekolloider med radionuklider kan transporteras på samma sätt. Vattenlösta nuklider kan *sorberas* till de olika materialen i kapseln. Vissa nuklider kan också *transporteras i gasfas*.

Slutligen kan vatten dämpa energin hos neutroner i kapselns hålrum. Lågenergetiska neutroner kan därefter orsaka *fission* av vissa nuklider i bränslet, under frigörande av fler neutroner. Om förhållandena är ogynnsamma kan kriticitet uppnås, dvs processen blir självunderhållande.

Det fullständiga THMC-diagrammet för bränsle/hålrum visas i figur 2-2.

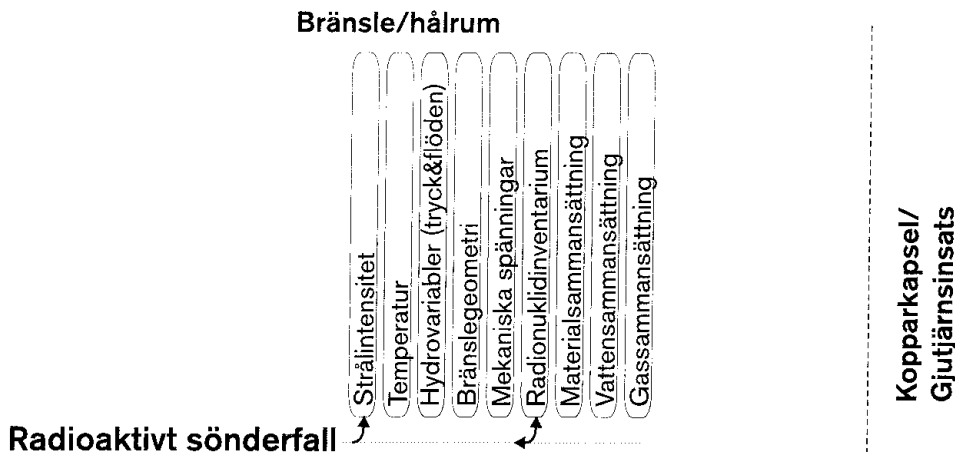
# Bränsle/hålrums



Figur 2-2. THMC-diagrammet för bränsle/hålrums. Processer i kursiv stil förekommer endast då kopparkapselns isolering är bruten.

## 2.3 Strårelaterade processer

### 2.3.1 Radioaktivt sönderfall



Figur 2-3. Radioaktivt sönderfall.

#### Överblick, allmän beskrivning

Genom radioaktivt sönderfall omvandlas innehållet av radionuklider i bränslet samt i de delar av kapselns hålrum radionuklider eventuellt spritts till. Vid sönderfallen alstras  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ - och neutronstrålning samt nya nuklider. Även dessa kan vara radioaktiva och sönderfaller tills resultatet blir en stabil nuklid.

Processen är av fundamental betydelse, framför allt eftersom den beskriver hur farligheten och sammansättningen hos bränslet utvecklas med tiden. Energin som frigörs omvandlas till största delen till värme, avsnitt 2.3.2, och processen utgör därmed även grunden till beskrivningen av förvarets termiska utveckling.

#### Modellstudier/experimentella studier

Radioaktivt sönderfall har under lång tid studerats ingående experimentellt och den teoretiska förståelsen för processen är mycket god.

#### Tidsperspektiv

Den tid det tar för hälften av alla radioaktiva atomer att sönderfalla kallas för det radioaktiva ämnets halveringstid. Halveringstiderna för olika radioaktiva ämnen varierar från bråkdelar av sekunder upp till miljontals år.

#### Naturliga analogier

Radioaktiva ämnen förekommer naturligt och det är genom studier av dessa som kunskaperna om radioaktivitet utvecklades under första årtiondena av detta århundrade.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

**Osäkerheter i förståelse:** Förståelsen av processen är tillräckligt god för säkerhetsanalysens behov.

**Osäkerheter i data:** Halveringstiderna för aktuella radionuklider är i allmänhet kända med god noggrannhet.

Nya data kring halveringstiderna för Se-79 och Sn-126 har tillkommit; detta diskuteras i avsnitt 2.7.8.

Osäkerheter kring inventariet vid deponering diskuteras av /Andersson, 1999/.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

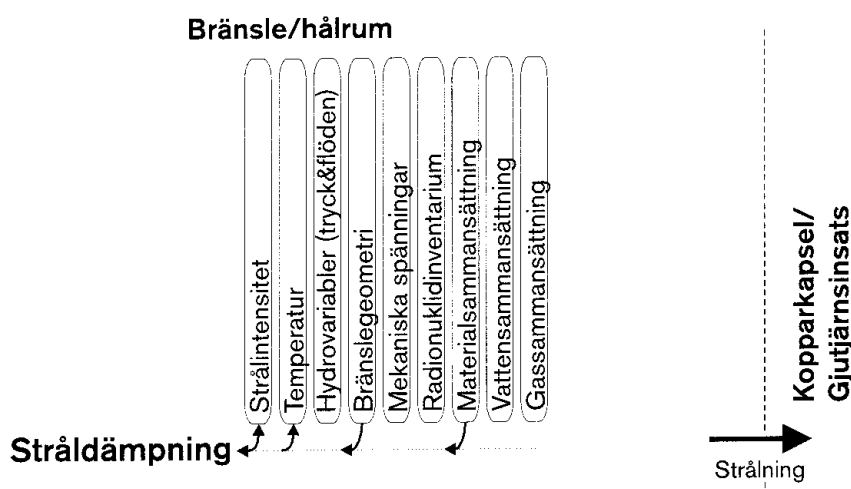
**Basscenario:** Processen hanteras med modellberäkningar.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenario.

**Klimatförändringar:** Se basscenario.

**Jordskalv:** Se basscenario.

### **2.3.2 Stråldämpning/värmealstring**



*Figur 2-4. Stråldämpning/värmealstring.*

### **Överblick, allmän beskrivning**

Strålningen från det radioaktiva sönderfallet växelverkar med materialen i bränslet och kapselns hålrums. Energi överförs därigenom till materialen och strålningen dämpas, attenueras. Huvuddelen av den överförda energin omvandlas till termisk energi; värmealstring. Effekten som utvecklas i bränslet sedan det tagits ur drift benämns resteffekt och beror av innehållet av radionuklider. Till en början dominerar värmeutvecklingen helt av beta- och gammasönderfall, men i ett längre perspektiv har även alfasönderfallen en viss betydelse /Håkansson, 1996/. De isotoper, som dominerar under de första hundratalen år är Cs-137 (Ba-137m) och Sr-90 (Y-90), båda med halveringstider på ungefär 30 år, vilket också ger en halvering av värmeutvecklingen på 30 år.



Processen är av grundläggande betydelse eftersom den beskriver hur värme alstras av strålningen. Dessutom bestämmer dämpningen hur mycket av den genererade strålningen som når kapseln.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Värmeutvecklingen är direkt beroende av det radioaktiva sönderfallet, se avsnitt 2.3.1.

### **Tidsperspektiv**

Värmealstringen har betydelse under några hundratals år. Efter 1000 år är värmealstringen i bränslet endast cirka 5 procent jämfört med situationen vid deponeringstillfället.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Osäkerheter i förståelse: Värmeutvecklingen som funktion av tid kan, när nuklidinnehållet är känt, beräknas med stor noggrannhet. Förståelsen av processen är tillräckligt god för säkerhetsanalysens behov.

Osäkerheter i data: Osäkerheterna för värmeutvecklingen kommer från osäkerheterna i nuklidinnehållet i bränslet. Dessa osäkerheter diskuteras i /Andersson, 1999/.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

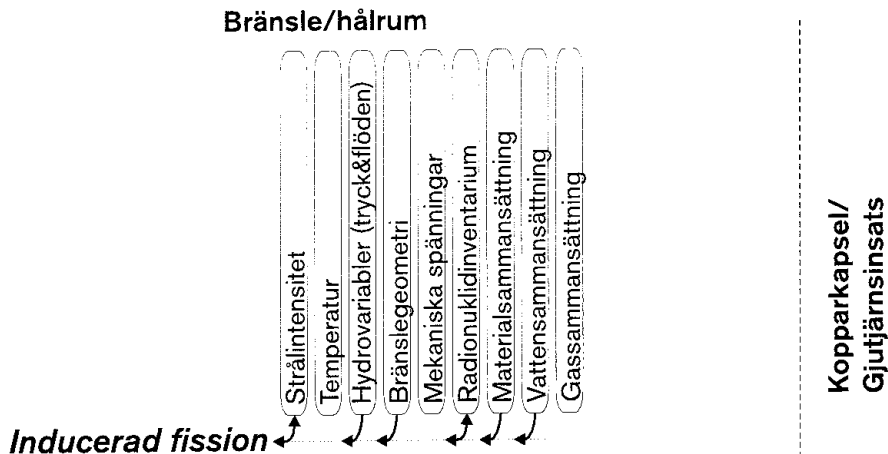
**Basscenario:** Den totala effektutvecklingen i bränslet beräknas utifrån radionuklidinnehållet samt sönderfallsenergier och halveringstider.

**Kapseldefektsscenario:** Se basscenario.

**Klimatförändringar:** Se basscenario.

**Jordskalv:** Se basscenario.

### 2.3.3 Inducerad fission (kriticitet)



Figur 2-5. Inducerad fission (kriticitet). Processen är endast relevant då kopparkapseln är skadad.

#### Överblick och allmän beskrivning

Neutroner från radioaktiva sönderfall kan orsaka kärnklyvning (fission) hos vissa isotoper i bränslet. Så länge kopparkapseln är intakt kommer det stora flertalet neutroner som alstras vid sönderfallen att passera ut ur bränslet utan att åstadkomma fission och processen kan försummas.

För framförallt U-235 och Pu-239, ökar effektiviteten i processen om neutronerna genom kollisioner med lätta atomkärnor modereras (bromsas) till lägre energier. Förutsättningar för detta skulle kunna finnas om vatten tränger in i en trasig kapsel. Vattnet med sina lätta vätekärnor skulle då kunna fungera som moderator. Vid fissionen frigörs nya neutroner och om det bildas fler neutroner än det förbrukas kan processen bli självunderhållande. Systemet sägs då vara *kritiskt* och stora mängder energi kan då frigöras. Det är denna process som under kontrollerade former utnyttjats i kärnreaktorn för energiproduktion.

Med kapselns nuvarande utformning kan inte kriticitet uppstå om vatten tränger in i kapseln och bränsleelementen är intakta och inte helt oanvända /Efrainsson, 1996a, 1996b/.

Om bränsleelementen skadats och uran och plutonium lakats ut, finns det inga trovärdiga utvecklingar som skulle kunna leda till kriticitet /Oversby, 1996, 1998/.

#### Modellstudier/experimentella studier

Kärnklyvning har under lång tid studerats ingående experimentellt och den teoretiska förståelsen för processen är mycket god. Riskerna för kriticitet i kapseln har studerats av /Efrainsson, 1996a, 1996b/.

### Tidsperspektiv

Andelen klyvbart material i det använda bränslet förändras obetydligt med tiden och möjligheten till kriticitet kommer att vara oförändrad under tusentals år.

### Naturliga analogier

Kriticitet har studerats vid den naturliga reaktorn i Oklo, se Oversby /1996, 1998/.

### Sammanfattning av osäkerheter

**Grundläggande förståelse:** Processen är ingående studerad inom reaktorfysiken. Förståelsen är tillräcklig för säkerhetsanalysens behov.

**Dataosäkerheter:** Dataosäkerheter m m för situationen med trasig kapsel i djupförvaret tillkommer. Det finns osäkerheter kring situationen för en trasig kapsel i djupförvaret. Slutsatsen att risken för kriticitet kan försummas kvarstår dock.

### Hantering i säkerhetsanalysen

**Basscenario:** Inte relevant.

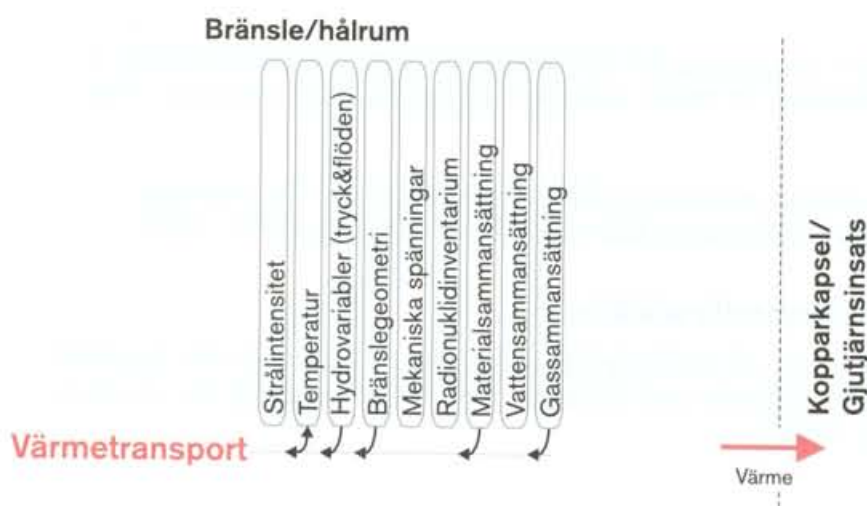
**Kapseldefektscenario:** Redovisning av kriticitetsstudier för olika bränsletyper och utbränningsgrader för en skadad kapsel direkt i huvudrapporten.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

## 2.4 Termiska processer

### 2.4.1 Värmetransport



Figur 2-6. Värmetransport.

## **Överblick**

Värme transporteras i bränsle och hålrum genom ledning och strålning över till kapselinsatsen och vidare till när- och fjärrrområde. Processen beror av bränslets geometriska utformning samt materialens termiska egenskaper som ges av materialsammansättningarna. Värmeöverföringen till kapselinsatsen sätter randvillkoren för processen. Resultatet blir en förändring av temperaturen i bränsle/hålrum.

Processen utgör en del i förvarets termiska utveckling.

## **Allmän beskrivning**

Beroende på restgassammansättningen i hålrummet och beroende på strålningsegenskaperna<sup>2</sup> hos metallytorna på bränsleelementen och kapselinsatsen, kan värmeledning eller strålning komma att dominera värmeöverföringen mellan bränsle och kapsel. Temperaturen i bränslet och i hålrummet kommer att påverkas av hela kedjan av värmeöverföringar mellan de olika komponenterna i förvaret. I det längre perspektivet kommer temperaturutvecklingen i bränsle och hålrum att styras av effektutvecklingen i bränslet. I ett kortare perspektiv kommer förändringarna med tiden av värmeöverföringsegenskaperna hos olika komponenter i förvaret att ha stor påverkan på bränslets temperatur. Bränslets högsta temperatur kommer att nås kort tid efter deponeringen.

## **Modellstudier/experimentella studier**

Temperaturberäkningar för kapseln har genomförts /Renström, 1997; Bjurström och Bruce, 1997, 1998/. Osäkerheter kring värmeöverföringen mellan de olika komponenterna i kapseln påverkar resultatet kraftigt. Experimentella undersökningar kommer därför att genomföras.

## **Tidsperspektiv**

Bränslets högsta temperatur nås kort tid efter deponering. Avsvalnandet till nära omgivningstemperatur tar flera tusen år.

## **Naturliga analogier**

Inte relevant.

## **Sammanfattning av osäkerheter**

**Förståelse:** Den grundläggande förståelsen för processen är tillräcklig för säkerhetsanalysens behov.

**Dataosäkerheter:** Osäkerheter kring värmeövergången mellan kapslingsrören och gjutjärnsinsatsen leder till osäkerheter i bedömningen av temperaturen på bränslet. Jämfört med osäkerheterna kring värmeöverföringen mellan gjutjärnsinsatsen och kopparkapseln och mellan kapselytan och bentonitbufferten innan full vattenmättnad uppnåtts är osäkerheterna kring värmeöverföringen från bränslet till kapselinsatsen små.

## **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** I basscenariot görs en uppskattning av den maximala temperatur som bränslet uppnår. Detta kan göras med hjälp av Renström /1997/ och Bjurström och Bruce /1997, 1998/.

<sup>2</sup> Uttryckt som emissivitet dvs förmåga att utsända elektromagnetisk strålning.

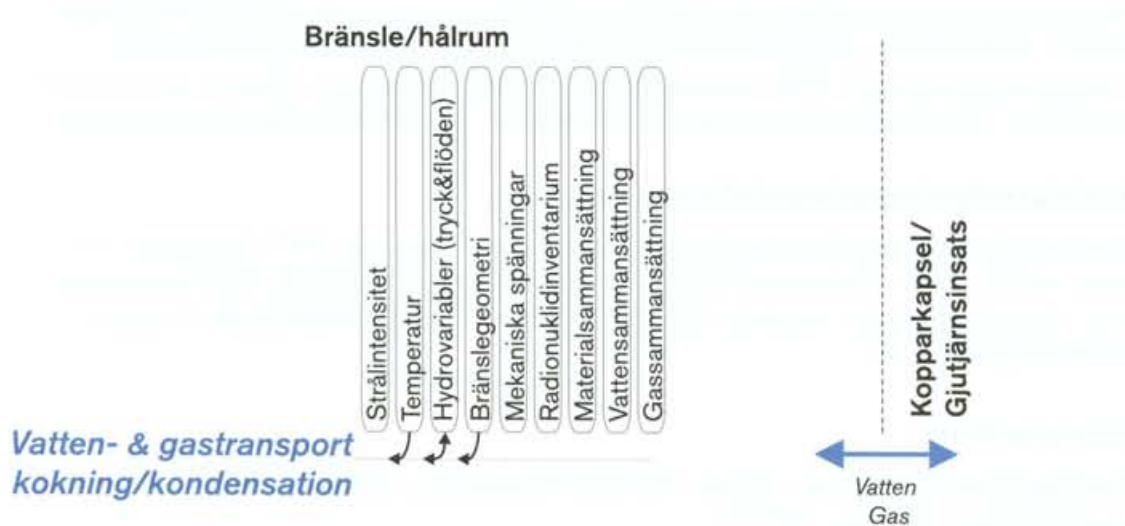
**Kapseldefektscenario:** Inträngande vatten modifierar värmeledningsegenskaperna i kapselns inre endast marginellt. Beskrivningen av värmeledning i kapseldefektscenario antas därför hamna inom ramen för osäkerheterna för motsvarande beskrivning i bas-scenariot.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenario. Annars: Se basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenario. Annars: Se basscenariot.

## 2.5 Hydrauliska processer

### 2.5.1 Vatten- och gastransport i kapselns hålrum, kokning/kondensation



*Figur 2-7. Vatten/gastransport, kokning/kondensation. Processen är endast relevant då kopparkapseln är skadad.*

#### Överblick

Om kopparkapseln penetreras kan vatten tränga in i kapselns hålrum som vätska eller ånga. Transporten av vatten, vattenånga och andra gaser i kapseln bestäms sedan av den detaljerade geometrin för kapselns hålrum, förekomsten av vatten/ånga i hålrummen samt temperatur och tryck. Kokning/kondensation utgör en integrerad del av vatten/gastransporten. Tryck och flöden av vatten och gas vid övergången till bufferten sätter randvillkoren för processen.

Processen är starkt kopplad till flera andra processer, bland annat korrosion av kapselinsatsen, där vatten förbrukas och vätgas bildas.

Vatten/gastransport i kapseln har grundläggande betydelse för en rad andra processer som är beroende av förekomsten av vatten i kapseln såsom bränsleupplösning, radionuklidtransport och korrosion av kapselinsatsen.

### **Allmän beskrivning och Modellstudier/experimentella studier**

Om kapseln penetreras kommer vatten att tränga in. Förloppet styrs av tryckskillnaden mellan buffert och hålrum i kapseln (initialt 5-7 MPa) och den hydrauliska konduktiviteten i bentoniten. Vatteninträngningen kan förväntas bli mycket långsam. I närvaro av vatten i kapseln kommer gas att produceras dels genom radiolys, se avsnitt 2.7.3, dels genom korrosion av gjutjärnsinsatsen (avsnitt 3.7.1). Uppbyggnaden av gastryck i kapseln kommer att leda till successivt minskande inströmning av vatten och när trycket blir tillräckligt högt, gastransport genom kapseln och bentoniten. Förloppet har utretts i flera rapporter sedan 1990 för sprickor på kapseln /Börgesson, 1990; Henshaw et al, 1990/ och för hål på kapseln /Wikramaratna et al, 1993/ och senast i detalj av /Bond et al, 1997/.

Kvalitativt kan händelseförloppet beskrivas så att vatten tränger genom hålet i koppar-kapseln och orsakar anaerob korrosion av järnytorna. Detta leder till vätgasbildning, som gradvis ökar trycket inne i hålrummet i kapseln och minskar på det sättet inträngningen av vatten. Korrosionen leder till att vatten förbrukas. Om den tillgängliga ytan för korrosion är konstant kommer även hastigheten för vattenförbrukningen att vara konstant och vattennivån i kapseln kommer att nå ett högsta värde och därefter sjunka. Beroende på storleken på hålet i kapseln och korrosionshastigheten, ser /Bond et al, 1997/ tre möjligheter:

- 1) Om hålet är så litet att vatten förbrukas av korrosion i samma takt som det tränger in kommer inget vatten att samlas inne i kapseln. Vätgastrycket byggs successivt upp och närmar sig asymptotiskt det yttre vattentrycket. Korrosionshastigheten kommer att styras av indiffusionen av vattenånga och även den avtar asymptotiskt mot noll.

De hålstorlekar för vilka detta gäller beror på korrosionshastigheten. För en korrosionshastighet av  $0,1 \mu\text{m}/\text{år}$  ska arean av hålet vara mindre än  $8,25 \text{ mm}^2$ . För en korrosionshastighet på  $1 \mu\text{m}/\text{år}$  blir motsvarande hålstorlek  $825 \text{ mm}^2$ . När intransporten av vatten på grund av tryckskillnaden mellan insidan och utsidan av kapseln är lägre än intransporten genom diffusion kommer kapselkorrosionen att bli diffusionsstyrd (se nedan).

- 2) Om hålet i kapseln är större än i fall 1), men fortfarande tillräckligt litet, kommer vatten att samlas inne i kapseln. Vattnet kommer att helt förbrukas innan trycket i kapseln når det yttre trycket. Därefter kommer korrosionen att vara begränsad av vattentillförseln och minska med ökat vätgastryck som i fall 1). Vätgastrycket byggs successivt upp och närmar sig asymptotiskt det yttre trycket och på motsvarande sätt avtar korrosionshastigheten asymptotiskt mot noll.

På samma sätt som för fall 1 beror hålstorleken av korrosionshastigheten. Kombinationen korrosionshastighet  $0,1 \mu\text{m}/\text{år}$  och hålstorlek  $20 \text{ mm}^2$  tillhör t ex den här kategorin. När intransporten av vatten på grund av tryckskillnaden mellan insidan och utsidan av kapseln är lägre än intransporten genom diffusion kommer kapselkorrosionen att bli diffusionsstyrd (se nedan).

3) Om hålet är tillräckligt stort i förhållande till korrosionshastigheten kommer vätgasstrycket att nå det yttre trycket medan det fortfarande finns vatten i kapseln. Om vattennivån då är lägre än hålet i kopparkapseln börjar vätgas att läcka ut men det inre trycket är fortfarande högt och hindrar att nytt vatten kommer in i kapseln. Om vattennivån i kapseln ligger över hålet i kopparkapseln, kommer först vatten att pressas ut till dess att vattnet kommer i nivå med hålet. Därefter kommer vätgas att läcka ut så länge korrosionen pågår, det vill säga till dess att allt vatten i kapseln förbrukats.

På samma sätt som för fall 1 beror hålstorleken på korrosionshastigheten och kan illustreras av fallen  $0,01 \mu\text{m}/\text{år}$  och hålstorleken  $5 \text{ mm}^2$  och  $1 \mu\text{m}/\text{år}$  och hålstorleken  $0,18 \text{ m}^2$ , som båda tillhör fall 3. När intransporten av vatten på grund av tryckskillnaden mellan insidan och utsidan av kapseln är lägre än intransporten genom diffusion kapselkorrosionen att bli diffusionsstyrd (se nedan).

Efter att vatten i vätskeform förbrukats kommer järnkorrosionen ändå att fortsätta eftersom vattenånga kan diffundera in i kapseln. Även detta fall har modellerats av Bond et al /1997/ för olika korrosionshastigheter, hål i kapseln och den area innanför hålet som korroderar.

Inga experimentella studier av förloppet för vatteninträning och vattenförbrukning genom vätgasproducerande korrosion har genomförts.

### **Tidsperspektiv**

Efter kapselskadan rör sig tidsförloppet om hundratals upp till hundratusentals år /Bond et al, 1997/.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

**Grundläggande förståelse:** Tillräcklig för säkerhetsanalysens krav.

**Dataosäkerheter:** För produktionen av korrosionsgaser är korrosionshastigheterna väl bestämda empiriskt och kan modelleras med en konstant korrosionshastighet om vattentillgången inte är begränsande /Smart et al, 1997/. Om korrosionshastigheten är större än tillförseln av vatten kommer korrosionsförloppet att styras av transporten av vatten in i kapseln /Bond et al, 1997/.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Inte relevant.

**Kapseldefektscenario:** Processen redovisas som en del av en integrerad beskrivning av utvecklingen av kapselns inre efter en skada.

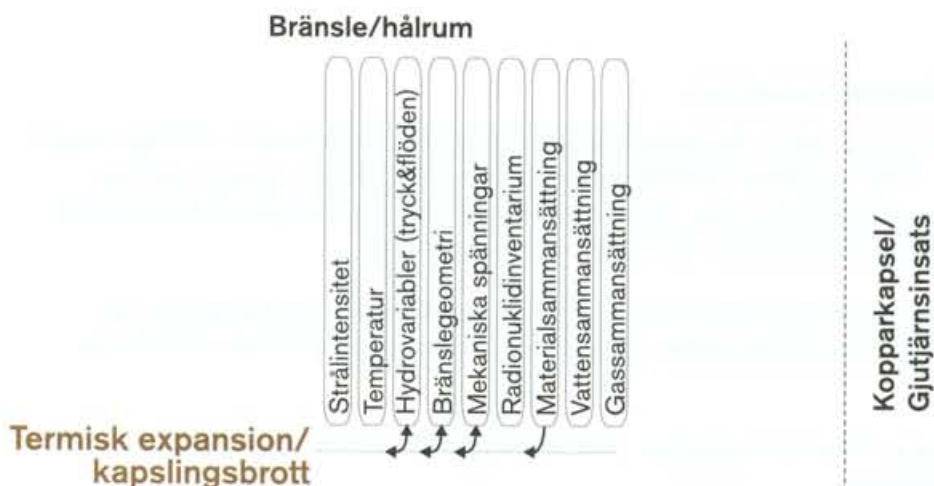
**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.



## 2.6 Mekaniska processer

### 2.6.1 Termisk expansion/kapslingsbrott



Figur 2-8. Termisk expansion/kapslingsbrott.

#### Överblick/Allmän beskrivning

Temperaturförändringar i bränslet och mekanisk påverkan i samband med hantering och transport kommer att påverka kapslingen. Temperaturförhöjningar leder till ökat gastryck inuti kapslingsrören och kan orsaka brott. Upptag av väte under reaktordriften kan ha lett till hydridbildning med försprödning vilket gynnar brott på kapslingsrören. Skadorna kommer i de övervägande antalet fall att vara lokala och leda till att bränslet är inneslutet i ett läckande kapslingsrör.

Processen har betydelse för frigörelsen av radionuklider från bränslet. Detta kan endast ske om kapslingsrören är skadade.

#### Modellstudier/experimentella studier

Experimentella studier och modellering har genomförts för torrlagringsändamål /BEFAST III, 1997/. Hydridbildning och fördröjt brott har studerats sedan länge /Northwood och Kosasih, 1983; Grigoriev, 1996/. Rothman /1984/ har gjort en genomgång av kunskapsläget utifrån kraven för direktdeponering av använt bränsle. Slutsatsen var att brott på grund av hydridbildning, om än osannolikt, inte kan helt uteslutas.

#### Tidsperspektiv

En mindre del av bränslestavarna måste antas ha skador vid deponeringstillfället. Även efter deponering kan hydridbildning leda till sprickor i kapslingen.

#### Naturliga analogier

Inte relevant.



## Sammanfattning av osäkerheter

Förståelsen av processen är inte tillräcklig för att tillåta en säker kvantifiering. I de fall då processen har betydelse, dvs då kopparkapseln är skadad, kan den hanteras pessimistiskt, se nedan.

## Hantering i säkerhetsanalysen

**Basscenario:** Processen saknar betydelse för den långsiktiga säkerheten så länge kopparkapseln är intakt. För att kunna diskutera återtag kan pessimistiskt ansättas att alla kapslingsrör kan vara skadade, men att de fortfarande utgör fysiskt skydd för bränslet samt att bränsleelementen behåller sin ursprungliga geometri.

**Kapseldefektscenario:** Pessimistiskt antas samtliga kapslingsrör vara skadade vid modelleringen av radionuklidtransport i kapseldefektscenariot /se vidare Andersson, 1999/.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

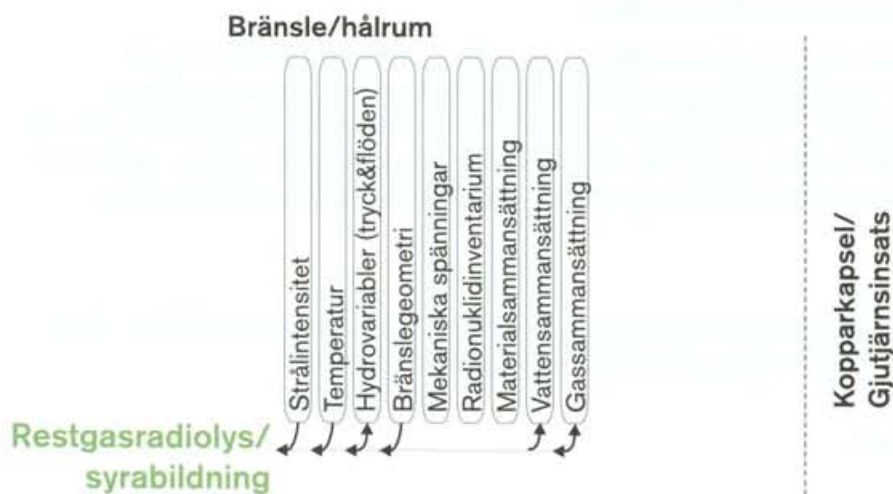
**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

## 2.7 Kemiska processer

### 2.7.1 Advektion och diffusion

Vattenlösta ämnen i kapselns inre kan transporteras genom advektion och diffusion. Dessa processer diskuteras inte explicit, utan behandlas (ofta pessimistiskt förenklat) integrerat med andra processer. Se även avsnitt 2.8.

### 2.7.2 Restgasradiolys/syrabildning



Figur 2-9. Restgasradiolys/syrabildning.

### **Överblick, allmän beskrivning**

Genom radiolys kan luft och vatten i en intakt kapsel sönderdelas. Produkterna kan sedan genom reaktioner med vatten/vattenånga omvandlas till korrosiva gaser som salpetersyra och salpetersyrighet. Dessa gaser kan ha betydelse för spänningskorrosion på kapselinsatsen, se avsnitt 3.7.3.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Produktionen av salpetersyra har beräknats av Marsh /1990/; Henshaw et al /1990/ och Henshaw /1994/ för två olika dosrater och för olika mängder luft och vatten i kapseln. Inte oväntat beror mängden bildad salpetersyra av tillgängliga mängder vatten och luft. Den hastighet salpetersyran bildas med beror av dosraten. Beräkningarna visar att för 50 g vatten kan knappt 160 g salpetersyra bildas /Henshaw et al, 1990/. Om kapseln evakueras och luften ersätts med en ädelgas blir mängden salpetersyra betydligt lägre. För 0,01 procent restluft kommer mängden salpetersyra att vara några tiondels milligram.

### **Tidsperspektiv**

Omvandlingen av restluft och vatten till salpetersyra sker under loppet av år till tiotals år Henshaw et al /1990/; Henshaw /1994/.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

### **Sammanfattning osäkerheter**

Den största osäkerheten gäller mängden vatten, som oavsiktligt kan föras in i kapseln. Bränsleknippena kommer att torkas innan de överförs till kapseln. De beräkningar som genomförts har utgått från att 50 g vatten kan följa med in i kapseln trots torkningen. Denna mängd motsvarar tomvolymen inne i en punkterad bränslepinne. Eftersom det stora flertalet bränslepinnar kommer att vara intakta, är detta en mycket pessimistisk övre gräns och i det stora flertalet kapslar kommer mängden vatten att vara betydligt mindre.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

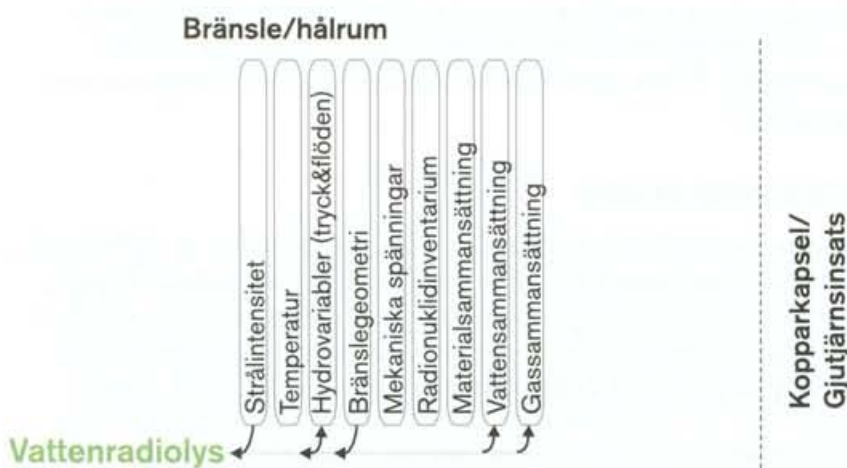
**Basscenario:** Restluft, vatten och radiolytiskt bildad salpetersyra kommer att förbrukas genom korrosionsreaktioner med kapselinsatsen. Den totala omfattningen av allmänkorrosionen är försumbar. Processen kan därför försummas i säkerhetsanalysen. Konsekvenser av spänningskorrosion diskuteras i avsnitt 3.7.3.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

## 2.7.3 Vattenradiolys



Figur 2-10. Vattenradiolys. Processen är endast relevant då kopparkapseln är skadad.

### Överblick, allmän beskrivning

Eventuellt vatten som tränger in i kapseln och når hållrummen mellan bränsleelement och kapselinsats sönderdelas i reducerande och oxiderande beståndsdelar av gammastrålningen i kapselns hållrum. De oxiderande species som bildas kommer troligen att förbrukas genom korrosion av främst kapselinsatsen, men även i viss utsträckning av bränslekapslingen. Radiolys vid bränsleupplösning hanteras i avsnitt 2.7.5.

Produktionen av reducerande species resulterar i en uppbyggnad av vätgas i tomrummet i kapseln. Efter en viss tid kommer vätgastrycket att nå ett konstant värde och det fortsatta resultatet av gammarradiolysen blir återbildning av vatten /Christensen och Bjergbakke, 1982; Christensen och Bjergbakke, 1984/. Mängden vätgas som produceras genom radiolys är beroende av gammadosraten. Bidraget från radiolys till vätgasbildningen är försumbart jämfört med bidraget från korrosion av gjutjärnsinsatsen (se avsnitt 3.7.1).

### Modellstudier/experimentella studier

Radiolys av vatten är väl studerat med både experiment och modellering /Spinks och Woods, 1990/.

### Tidsperspektiv

Processen bidrar till vätgasbildningen under de första hundratalen år efter deponering. Därefter har gammastrålningen avtagit till försumbara nivåer.

### Naturliga analogier

Inte relevant.

### Sammanfattning av osäkerheter

**Förståelse:** Den grundläggande förståelsen av denna process är tillräcklig för säkerhetsanalysens behov.

**Dataosäkerheter:** Det finns inga dataosäkerheter av betydelse för säkerhetsanalysen.

### Hantering i säkerhetsanalysen

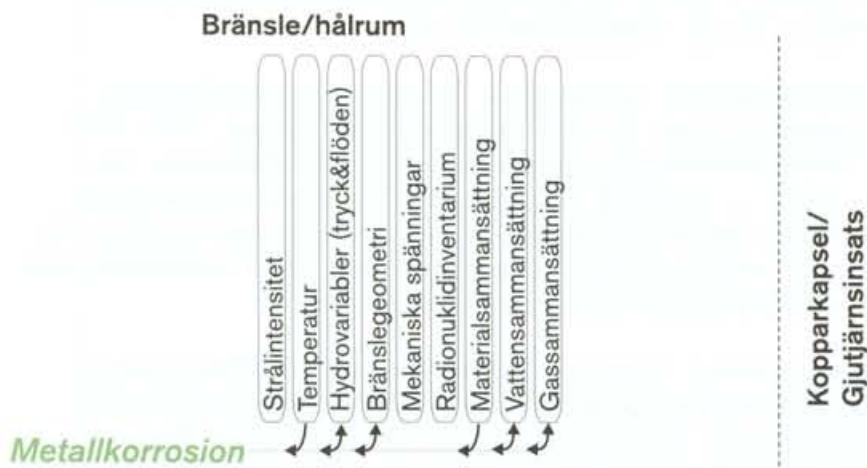
**Basscenario:** Inte relevant.

**Kapseldefektscenariot:** Bidraget från radiolys till vätgasproduktion och övrig miljöpåverkan försummas. Radiolys vid bränsleupplösning hanteras i avsnitt 2.7.5.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

## 2.7.4 Metallkorrosion



Figur 2-11. Metallkorrosion. Processen är endast relevant då kopparkapseln är skadad.

### Överblick

Eventuellt vatten i kapselns hålrum kan leda till korrosion av kapslingsrör och andra metalldelar i bränslet. Processen styrs förutom av sammansättningen av kapslingsrör och metalldelar främst av den kemiska miljön i kapselns hålrum samt av temperaturen.

Processen påverkar den isolerande funktionen hos kapslingsrör och metalldelar som omsluter bränslet och har därmed betydelse för frigörandet av radionuklider från bränslet. Korrosionen av metalldelar leder dessutom till frigörelse av de aktiveringsprodukter som bildats i metalldelarna.

### **Allmän beskrivning**

Kapslingsrören till bränslet består av Zirkaloy. Övriga strukturelement i bränslet består av rostfritt stål, Inconel, Incoloy eller Zirkaloy. En del av radioaktiviteten i bränslet finns i kapslingsrören och övriga metalldelar som aktiveringsprodukter.

Om vatten tränger in i kapseln kommer metalldelarna att korrodera. Korrosionen och därmed frigörelsen av aktiveringsprodukter kommer att styras av upplösningshastigheten av den ytfilm av zirkoniumdioxid, som är tätt bunden till metallytan. Upplösningen av oxidfilmen kommer att styras av lösligheten av  $ZrO_2$  i vattnet i bränslets omedelbara närhet och borttransporten av lösta zirkoniumspecier. Lösligheten av  $ZrO_2$  i vatten är mycket låg, i storleksordningen  $10^{-9}$  M /Bruno et al, 1997/.

Med den låga korrosionshastigheten för Zirkaloy och med hänsyn till den låga lösligheten av  $ZrO_2$  i vatten, kommer hastigheten för frigörelsen av aktiveringsprodukter från kapslingsrören att vara mycket låg.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Några studier av korrosionshastigheten för Zirkaloy har inte genomförts av SKB, men utförlig litteraturgenomgång gjordes 1984 av Lawrence Livermore National Laboratory för ett slutförvar i tuff /Rothman, 1984/. Från Rothmans data kan man uppskatta korrosionshastigheten till cirka 2 nm/år, det vill säga genombrott på kapslingsrören beräknas ske efter 400 000 år för en rörtjocklek på 0,8 mm.

Även om inga detaljundersökningar av korrosion av Zirkaloy i förvarsmiljö gjorts, har motsvarande undersökningar gjorts för titan /Mattsson och Olefjord, 1984, 1990; Mattsson et al, 1990/. Titans korrosionsegenskaper är mycket lika zirkoniums; den skyddas mot allmän korrosion av en ytfilm av titandioxid. Resultaten från undersökningarna visade att oxidfilmen förblev tätt bunden till den underliggande metallen och att korrosionshastigheten var extremt låg, cirka 2 nm/år, det vill säga i överensstämmelse med korrosionshastigheten för Zirkaloy baserat på Rothmans data.

De övriga konstruktionsmaterialen i bränslet är rostfria stål eller nickelbaslegeringar. SKB har inte genomfört några undersökningar av korrosionsbeständigheten av dessa material under förvarförhållanden. För det amerikanska "Nuclear Waste Management Program (NWMP)" har Godowski och Bullen /1988/ gjort en litteraturgenomgång av korrosionsbeständigheten av liknande material, möjliga att använda som material för inkapsling av kärnbränsle. Korrosionshastigheterna för kortare exponeringar i havsvatten, som sannolikt är aggressivare än grundvattnet i djupförvaret, pekar på värden om tiotals mikrometer per år för rostfria stål och mikrometer per år för nickelbaslegeringar. Frigörelsen av aktiveringsprodukter kommer att styras av dessa korrosionshastigheter.

### **Tidsperspektiv**

Efter att vatten kommit i kontakt med kapslingsrören uppskattas korrosion med åtföljande frigörelse av aktiveringsprodukter att ske med konstant hastighet under hundratals år. För rostfria komponenter är motsvarande tidsförlopp hundratals år och för nickelbaslegeringar tusentals år.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.



## **Sammanfattning av osäkerheter**

**Grundläggande förståelse:** Den grundläggande förståelsen av processen är tillräcklig för säkerhetsanalysens behov.

**Dataosäkerheter:** Osäkerheterna ligger huvudsakligen i om de korrosionshastigheter som observerats i korttidsexperiment är relevanta för geologiska tidsperioder.

Korrosionshastigheten för Zirkaloy (titan) är mätt under kort tid jämfört med den förväntade livslängden på kapslingsrören. Det största osäkerheterna kommer från extrapolationen av dessa korttidsdata. Mattsson och Olefjord /1990/ härleder en logaritmisk tillväxtlag för oxidskiktet på titan för mätdata på upp till tre år. Den visar en snabb tillväxt av ett initialt passiverande skikt på ca 7 nm, varefter ytterligare tillväxt sker ytterst långsamt. En extrapolation till  $10^6$  år ger ett oxidskikt på 12 nm.

Mattssons och Olefjords /1990/ data visar också att för längre tider, 5 och 6 år, avviker tillväxthastigheten från den logaritmiska lagen. Efter 6 år var skiktet 0,7 nm tjockare än beräknat, medan femårsproverna visade betydande avvikelse, 4,9 respektive 15,5 nm, vilket talar emot en extrapolering enligt den logaritmiska lagen. Vid de kortare exponeringarna var oxidskiktet amorft, men efter längre tider delvis kristalliserat. Det är därför möjligt att den högre tillväxthastigheten beror på en snabbare transport genom korngränser. Detta skulle kunna jämföras med aktiv korrosion följt av en snabb repassivering. Under första året växer skiktet cirka 8 nm från den nakna metallytan, som passiveras. Detta skulle kunna betraktas som en övre gräns för korrosionshastigheten och motsvara livslängd på 100 000 år för Zirkaloykapslingen.

Eftersom inga relevanta korrosionsdata tagits fram för övriga metallkomponenter i bränslet är osäkerheterna stora. Korrosionshastigheterna är betydligt större än för Zirkaloykapslingen och en mycket pessimistisk uppskattning skulle vara att sätta livslängden för dessa komponenter till 0 år.

## **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Inte relevant.

**Kapseldefektscenario:** Tillgängliga data tyder på en livslängd på kapslingsrören på minst 100 000 år. Rören kan pessimistiskt antas vara penetrerade redan vid deponeringen, men i stort sett ha kvar sin mekaniska integritet under mycket lång tid och fungera som ett mekaniskt stöd för kolonnen av bränslekutsar. Frigörelse av aktiveringsprodukter antas ske omedelbart.

Övriga metalldelar kan anses omedelbart upplösta vad gäller frigörelse och transport av radionuklider.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

## 2.7.5 Bränsleupplösning



Figur 2-12. Bränsleupplösning. Processen är endast relevant då kopparkapseln är skadad.

### Överblick

Om vatten tränger in i kapselns hållrum kan bränslet upplösas/omvandlas med bland annat frigörelse av radionuklider som följd. Processen, som kräver att kapslingsrörens isolering brutits, styrs framför allt av den kemiska miljön i gapet mellan bränsle och Zirkaloykapsling, speciellt förekomsten av oxidanter samt av bränslesammansättningen, där matrisstruktur och förekomsten av radionuklider i bränslematrisen är avgörande.

Processen är av grundläggande betydelse eftersom den beskriver frigörandet av radionuklider från bränslet.

### Allmän beskrivning

#### Icke matrisbunden aktivitet

Radionuklider i material som utskiljts till gapet mellan bränsle och kapslingsrör kommer snabbt att gå i lösning. Mängden frigjord aktivitet bestäms av lösligheten och tillgängligheten på utskiljt material. Frigörelsen från gapet är oberoende av upplösningen eller omvandlingen av urandioxiden i bränslet. Detta diskuteras utförligare i avsnitt 2.7.6.

#### Matrisbunden aktivitet

Huvuddelen av innehållet av fissionsprodukter och högre aktinider finns som fast lösning i urandioxidmatrisen. För att dessa radionuklider ska frigöras krävs att urandioxiden löses upp eller på annat sätt omvandlas, till exempel genom oxidation. Om vatten har trängt in i kapseln och bränslekapslingsrören är skadade kan detta ske.

#### Bränsleupplösning och frigörelse av radionuklider under syrefria förhållanden:

Urandioxid är stabil i syrefritt vatten med låg kiselaktivitet och U(IV) har mycket låg löslighet i vatten. Spridningen hos experimentella data spänner över flera storleksordningar /Fuger, 1993/, men tycks vara relativt oberoende av temperaturen.

Bruno et al /1997/ rekommenderar en löslighet av omkring  $1,3 \cdot 10^{-7}$  M för säkerhetsanalysen. Detta är ungefär en faktor hundra större än lösligheten för  $UO_2(s)$  och får betraktas som ett pessimistiskt vald löslighet.

Ämnen lösta i urandioxidmatrisen kommer att frigöras i takt med den kemiska upplösningen av urandioxiden. Den totala mängd som frigörs kommer styras av mängden upplöst uran, som i sin tur beror av samverkan mellan upplösningshastigheten, lösligheten av uran och vattenomsättningen kring kapseln.

#### **Bränsleupplösning och frigörelse av radionuklider under oxiderande förhållanden:**

I närvaro av syre kommer uran att oxideras till U(VI). Lösligheten för U(VI) species (uranyl) är betydligt högre än för U(IV) species. Lösligheten beror också av närvaron av komplexbildare, där karbonat är den viktigaste i naturliga svenska grundvatten. Bruno och Sellin /1992/ rekommenderar värden på lösligheten i intervallet  $3 \cdot 10^{-4}$  till  $3 \cdot 10^{-6}$  M, beroende på vattnets karbonathalt.

I närvaro av oxidanter kan det inte uteslutas att oxidationshastigheten av urandioxiden är högre än upplösningshastigheten. Detta skulle leda till upplösning följt av utfällning av fasta U(VI) faser på bränslet eller i bränslets närhet. Sammansättningen av dessa faser kommer att bero av vattensammansättningen. I grundvatten eller bentonitporvatten kommer troligen uranyloxider/hydroxider (schöpit) att dominera först, medan i ett längre tidsperspektiv mer stabila uranilsilikater (till exempel uranofan) kommer att bildas.

I takt med att urandioxiden omvandlas kommer ämnen inneslutna i bränslet att göras rörliga och kan, om de är lösliga, transporteras bort från bränslet ut i närområdet. Svårslösligare ämnen kan antingen fällas ut som separata faser, eller genom samfällning ingå i de uranfaser eller andra faser, som bildas på bränslet eller i dess omedelbara närhet.

**Redoxförhållanden vid vatteninträngning:** När vatten kommer i kontakt med bränslet kommer urandioxiden att börja lösas upp. Detta kommer att ske genom kemisk upplösning eller genom oxidation/korrosion av bränslet beroende av redoxförhållandena närmast bränslet. I gapet mellan bränsle och kapslingsrör kommer alfa- och betastrålningen att dominera. På samma sätt som gammastrålningen av vatten i tomrummet i kapseln (avsnitt 2.7.3) kommer alfa- och betastrålningen att sönderdela vattnet i oxiderande och reducerande species, huvudsakligen väte, syre och väteperoxid. Oxiderande och reducerande species produceras i ekvivalenta mängder och påverkar egentligen inte redoxförhållandena närmast bränslet.

Eftersom väte vid de temperaturer som är aktuella ( $< 100$  °C) är betydligt mer reaktionströgt än syre och väteperoxid kommer effekten av radiolysen att bli en oxidation av urandioxiden i bränslet till U(VI) species. Oxidationshastigheten bestäms av produktionshastigheten för oxiderande radiolysprodukter, hastigheten för oxidationsreaktionen och tillgänglig bränslearea för oxidation. Förloppet kommer att vara analogt med oxidationen av urandioxiden till schöpit hos defekta bränslestavar i en reaktor /Forsyth et al, 1990/. I ett förvar, där dosraten är mycket lägre än i reaktorn, kommer oxidationsprocessen att bli betydligt långsammare. Eftersom Zirkaloykapslingen, om än perforerad, förväntas finnas kvar kring bränslet mycket lång tid efter vatteninträngningen kommer bränslet att oxideras av den vattenvolym som finns mellan bränslet och kapslingsrören.



### **Modellstudier/experimentella studier**

Experimentella studier av bränsleupplösning har pågått i mer än 20 år, se till exempel Eklund och Forsyth /1978/ och Forsyth /1997/.

Den radiolytiska oxidationen av bränsle innanför Zirkaloykapslingen har modellerats av Eriksen /1996/. Eriksens slutsatser är att oxidationsprocessen domineras av reaktionen mellan väteperoxid och bränsle. I takt med att vätgasttrycket byggs upp kommer förbrukningen av oxidanter att minska, det vill säga oxidationen av bränslet avtar. Orsaken till detta är växelverkan mellan alfa- och betaradiolysen, där oxiderande radikaler från betaradiolysen förbrukas genom reaktioner med väte.

### **Tidsperspektiv**

Efter att vatten kommit i kontakt med bränslet kommer bränsleomvandlingen att pågå under hundratusentals år.

### **Naturliga analogier**

Naturligt förekommande uraninit kan vara till hjälp för att förstå vittringssekvensen för urandioxiden.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

**Grundläggande förståelse:** Det finns inga egentliga osäkerheter vad gäller den grundläggande förståelsen av processen. Osäkerheterna rör i första hand storleken på och betydelsen av de olika processer som styr bränsleomvandlingen.

**Redoxförhållanden vid bränsleupplösning:** Oxidation av järn kommer sannolikt att ske betydligt snabbare än oxidation av  $UO_2$  inuti en skadad kapsel. Någon direkt jämförelse har inte gjorts, men en uppskattning av tiden för att förbruka syret i en kopparkapsel visar att det restsyre som initialt kan vara närvarande förbrukas genom oxidation av koppar inom något år /Johnson et al, 1996/. Förbrukningstakten i en järnkapsel bör vara jämförbar, eftersom korrosionshastigheterna för järn och koppar är jämförbara /Wersin et al, 1993/. Några större osäkerheter kring att det vatten som kommer att komma i kontakt med bränslet skulle vara syrefritt finns därför knappast. Bränsleupplösningen bör därför modelleras som oxidativ upplösning där radiolysen av vatten är den enda källan till oxidanter. Som framgått av de tidigare diskussionerna kring beständigheten av Zirkaloy i förvarsmiljö kan kapslingsrören förutsättas finnas kvar kring bränslet under mycket lång tid och den miljö där bränsleoxidation/upplösningen sker kommer att bestämmas av grundvatten jämviktat med bentonit och alfa- och betastrålningen i gapet mellan bränsle och kapslingsrör /Eriksen, 1996/. Även om modellen är begreppsmässigt försvarbar, finns det många osäkerheter som kan påverka resultatet.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Inte relevant.

**Kapseldefektscenario:** I SR 97 används två modeller för omvandling av bränsle:

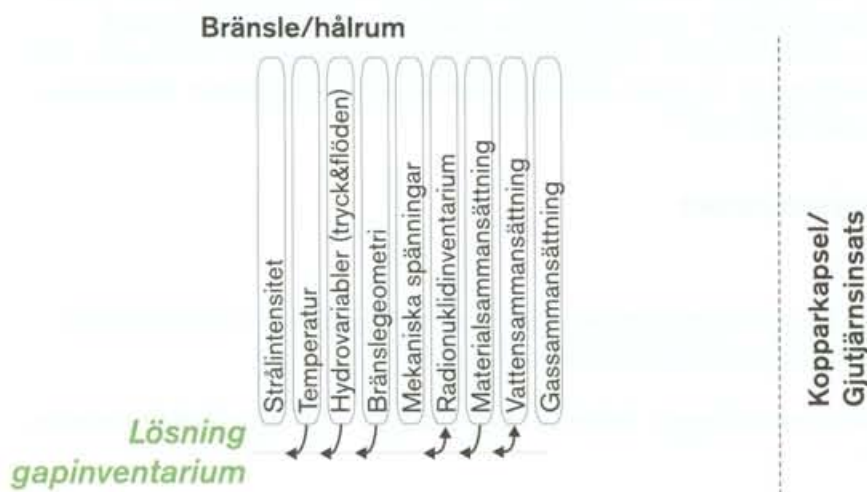
- I huvudfallet används en modell där omvandlingen antas vara styrd av radiolytiskt producerade oxidanter. I beräkningsmodellen förenklas förloppet genom att en konstant omvandlingshastighet används.

- För att illustrera betydelsen av bränslematrisens stabilitet kommer en beräkning att genomföras där bränslets barriärfunktion försummas. Detta är orimligt, men ger en övre gräns för konsekvenserna av processen. Detta beräkningsfall motiveras med att det fortfarande finns osäkerheter i förståelsen för bränslets upplösningsmekanismer.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Modifierade grundvattenkemiska förhållanden kan då eventuellt behöva diskuteras. Annars: Se basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

## 2.7.6 Lösning av gapinventarium



*Figur 2-13. Lösning av gapinventarium. Processen är endast relevant då kopparkapseln är skadad.*

### Överblick, allmänt beskrivning

Vid en kapselskada kan vatten tränga in i kapseln. Om bränslekapslingen är skadad kan vattnet också komma i kontakt med bränslet. Huvuddelen av radionukliderna i bränslet är jämnt fördelade i  $UO_2$  matrisen och frigörs i takt med att bränslet löses upp (se avsnitt 2.7.5). En liten andel av inventariet av ett fåtal radionuklider har utskiljts till gapet mellan bränsle och kapslingsrör och möjligen också till korngränser i bränslet (se avsnitt 2.1.3).

Vid kontakt med vatten kan dessa radionuklider snabbt gå i lösning. Mängden frigjord aktivitet bestäms av lösligheten och tillgängligheten på utskiljt material. En utredning om frigörelse från utskiljningar i bränsle har gjorts av Johnson och Tait /1997/.

### Modellstudier/experimentella studier

En omedelbar frigörelse av cesium och jod från bränslet vid kontakt med vatten är experimentellt bekräftad, se t ex Johnson och Tait /1997/.

### Tidsperspektiv

Frigörelsen kan betraktas som omedelbar (storleksordningen dagar).

### Naturliga analogier

Inte relevant.

### Sammanfattning av osäkerheter

**Osäkerheter kring grundläggande förståelse:** Den grundläggande förståelsen för processen är tillräcklig för säkerhetsanalysens behov.

**Dataosäkerheter:** Det är experimentellt påvisat att andelar av innehållet av fissionsgaser, cesium och jod kan lämna bränslematrisen under reaktordrift. Det är också känt att Tc, Ru, Rh, Pd och Mo bildar metalliska inneslutningar i bränslet. Det finns inga större systematiska undersökningar av utskiljningar i lättvattenreaktorbränsle med undantag av frigörelse av fissionsgaser. Osäkerheterna kring storleken av och i vissa fall också existensen av urskiljningar av vissa radionuklider är stor. Osäkerheter diskuteras i mer detalj av Johnson och Tait /1997/.

### Hantering i säkerhetsanalysen

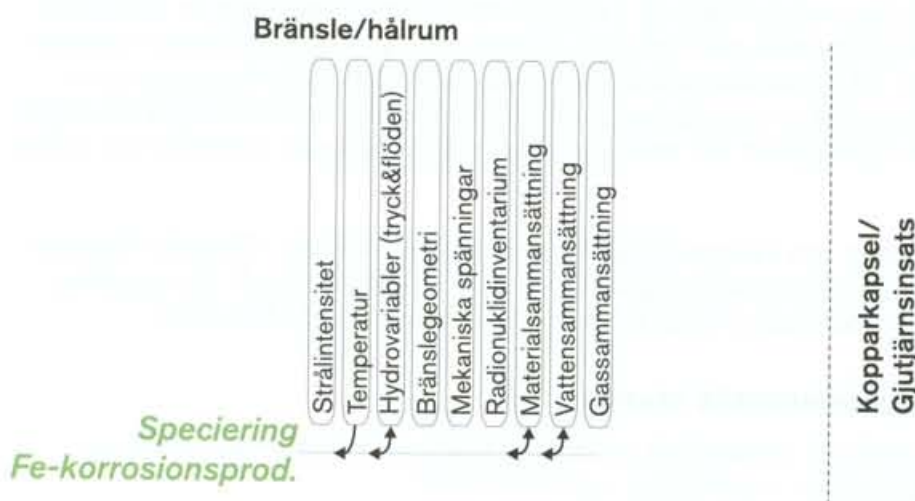
**Basscenario:** Inte relevant.

**Kapseldefektscenario:** Kapseldefektscenario: Omedelbar frigörelse av radionuklider enligt Andersson /1999/ baserat på Johnson och Tait /1997/.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

## 2.7.7 Speciering av järnkorrosionsprodukter



Figur 2-14. Speciering av järnkorrosionsprodukter. Processen är endast relevant då kopparkapseln är skadad.

### **Överblick, allmän beskrivning**

Om vatten tränger in kapseln kommer gjutjärnsinsatsen korrodera. Syret i vattnet har med största sannolikhet då redan förbrukats genom reaktioner med mineraler i bentoniten och genom att reagera med kopparkapseln. Om eventuellt restsyre skulle finnas i vattnet, kommer detta snabbt att förbrukas genom att reagera med gjutjärnet (se avsnitt 3.7.1) och den fortsatta korrosionen kommer att ske genom reaktion med vattnet. Vid reaktionen mellan gjutjärn och vatten produceras magnetit och vätgas.

Processen har avgörande betydelse för den vattenkemiska miljön i kapselns hålrum. Resultatet blir bland annat att reducerande förhållanden kommer att råda i hålrummet under mycket lång tid.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Det är väl känt att magnetit och vätgas bildas vid anaerob korrosion av järn. Det är också verifierat experimentellt för den vattenkemi som kan bli aktuell för djupförvaret /Blackwood et al, 1995; Smart et al, 1997/.

### **Tidsperspektiv**

Korrosionsprocessen kommer att pågå i tiotusentals år efter vatteninträning.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Inga konceptuella osäkerheter finns. Osäkerheterna gäller i första hand mängden löst Fe(II).

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Inte relevant.

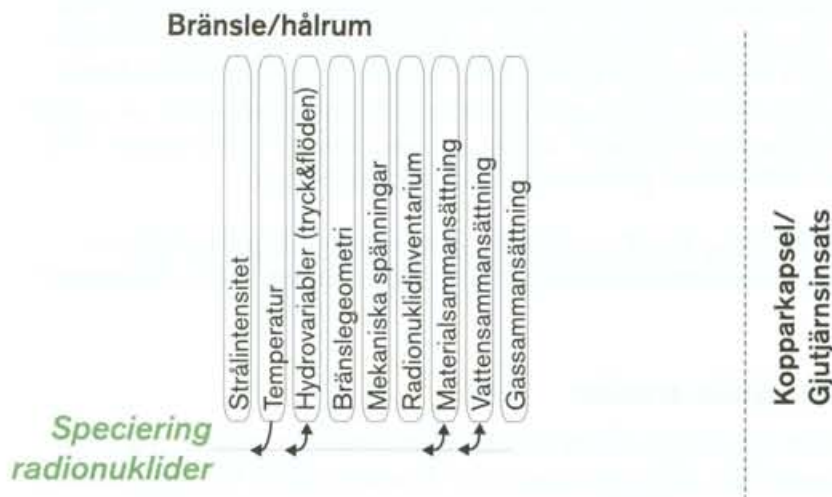
**Kapseldefektscenario:** En kvantitativ beskrivning av den kemiska miljön inuti en defekt kapsel ges.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Modifierade grundvattenkemiska förhållanden kan då eventuellt behöva diskuteras. Annars: Se basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.



## 2.7.8 Speciering av radionuklider, kolloidbildning



Figur 2-15. Speciering av radionuklider, kolloidbildning. Processen är endast relevant då kopparkapseln är skadad.

### Överblick, allmän beskrivning

Radionuklider som frigjorts från/frilagts i bränslematrisen och andra metalldelar kan lösas i vattnet i kapselns hålrum och därmed bli tillgängliga för transport eller falla ut som otillgängliga fasta faser. Fördelningen mellan lösta och fasta faser bestäms av ämnens lösligheter. Lösligheterna beror framför allt av den kemiska miljön i kapselns hålrum samt av temperaturen.

Alternativt kan radionuklider frigöras i form av kolloider eller som pseudokolloider. Detta har ingen betydelse för spridningen från kapseln så länge bentonitbufferten, som fungerar som ett effektivt filter för kolloider, finns kvar.

Den pågående korrosionen av kapselinsatsen gör att förhållandena är reducerande (se avsnitt 2.7.7). De lösligheter och den speciering som rekommenderas i Bruno et al /1997/ avser reducerande förhållanden och gäller därmed även för tomrummet i kapseln. Processen har grundläggande betydelse för transporten av radionuklider.

### Modellstudier/experimentella studier

**Löslighetsberäkningar för SR 97:** I löslighetsberäkningar för en säkerhetsanalys ansetts en löslighetsbegränsande fas för varje radioelement. I beräkningarna väljs faser som med stor säkerhet kan bildas under de förhållanden som råder. Amorfa faser väljs exempelvis istället för kristallina medan stabila sulfider och silikater som inte med säkerhet bildas ofta bortses ifrån helt i modelleringen. I löslighetsberäkningarna bestäms, förutom värdet på radioelementets löslighet, också specieringen i vattenfasen av samtliga radionuklider. Specieringen har betydelse för lösligheten, men också för radionuklidens transportegenskaper i buffert och berg. I tabell 2-2 finns de löslighetsbegränsande faserna som används i SR 97 samt de dominerande specierna /Bruno et al, 1997/.

**Tabell 2-2. Löslighetsbegränsande faser och speciering i SR 97.**

Element	Löslighetsbegränsande fas	Dominerande species
Ag	Silver/AgCl	$\text{AgCl}_x^y$
Am	$\text{AmOHCO}_3$	$\text{Am}(\text{OH})_2^+$ , $\text{AmCO}_2^+$ , $\text{AmOH}^{2+}$
Cm	$\text{CmOHCO}_3$	$\text{CmOH}^{2+}$
Ho	$\text{Ho}_2(\text{CO}_3)_2$	$\text{HoCO}_3^+$ , $\text{Ho}(\text{CO}_3)_2^-$
Nb	$\text{Nb}_2\text{O}_5$	$\text{NbO}_3^-$
Ni	NiO	$\text{Ni}^{2+}$ , $\text{NiCO}_3$
Np	$\text{Np}(\text{OH})_4$	$\text{Np}(\text{OH})_4$ , $\text{Np}(\text{OH})_3\text{CO}_3^-$ , $\text{Np}(\text{HPO}_4)_4^{6-}$
Pa	$\text{Pa}_2\text{O}_5$	$\text{PaO}_2\text{OH}$
Pd	PdO	$\text{Pd}(\text{OH})_2$
Pu	$\text{Pu}(\text{OH})_4$	$\text{Pu}(\text{OH})_4$ , $\text{PuCO}_3^+$ , $\text{Pu}^{3+}$
Ra	$\text{RaSO}_4$	$\text{Ra}^{2+}$ , $\text{RaSO}_4$
Se	$\text{FeSe}_{(2)}$ /Selen	$\text{HSe}^-$
Sm	$\text{Sm}_2(\text{CO}_3)_2$	$\text{SmCO}_3^+$ , $\text{Sm}(\text{CO}_3)_2^-$
Sn	$\text{SnO}_2$	$\text{Sn}(\text{OH})_4$ , $\text{Sn}(\text{OH})_5^-$
Sr	Celestit/Strontianit	$\text{Sr}^{2+}$
Tc	$\text{TcO}_2$	$\text{TcO}(\text{OH})_2$
Th	$\text{Th}(\text{OH})_4$	$\text{Th}(\text{OH})_4$ , $\text{Th}(\text{HPO}_4)_3^{2-}$
U	$\text{UO}_2$	$\text{U}(\text{OH})_4$
Zr	$\text{ZrO}_2$	$\text{Zr}(\text{OH})_4$

I det följande diskuteras tillgängliga modellstudier/experimentella studier för viktiga element i säkerhetsanalysen.

**Cesium och jod:** De ämnen som utskiljts till gapet mellan bränsle och kapslingsrör kommer att omedelbart frigöras vid kontakt med vatten. Dessa ämnen är cesium och jod, möjligen också **klor** och **kol**. För de tre förstnämnda finns inga löslighetsbegränsningar och de är heller inte redoxkänsliga. De mest troliga lösningsspecies är  $\text{Cs}^+$ ,  $\text{I}^-$  och  $\text{Cl}^-$ . Kol kan tänkas frigöras som karbonat, metan eller andra kolföreningar beroende på redoxförhållanden och redoxkinetik. Den kemiska formen för kol i  $\text{UO}_2$  bränsle är inte känd, men van Konynenburg /1994/ ser som möjliga alternativ karbid, oxykarbid eller elementärt kol. Under oxiderande förhållanden tycks frigörelsen från bränslet ske som koldioxid. Om kol föreligger som karbonat är det tänkbart att frigörelsen under vissa förhållanden är löslighetsbegränsad av utfällning av fasta karbonater.

Efter att gapinventariet lösts upp, kommer ytterligare upplösning av dessa ämnen att styras av bränsleoxidationen/omvandlingen.

**Strontium:** Strontium finns i fast lösning i bränslematrisen och är inte löslighetsbegränsad eller redoxkänslig. Det frigörs i takt med bränsleoxidationen/omvandlingen. Katjonen  $\text{Sr}^{2+}$  kommer att vara dominerande lösningsspecies. Beroende på vattenkemin kommer strontiumsulfat eller strontiumkarbonat att vara löslighetsbegränsande fasta faser. Det troligaste är att strontiumhalterna i vattnet aldrig kommer att nå löslighetsgränserna. Möjligen kan halterna strontium i vattnet minskas genom samfällning med kalciumkarbonat.

**Selen:** Andelen  $^{79}\text{Se}$  i bränslet är omkring 8 ppm enligt Origen-beräkningar (50 MWd/kg U, PWR) och cirka 1 ppm enligt analyser /MCC, 1988/. Totala mängden selen i bränslet är enligt Origen-beräkningarna ungefär 80 ppm. De radiometriska analyser som utfördes för MCC utgick från en halveringstid av 65 000 år. Nya bestämningar har givit en halveringstid för  $^{79}\text{Se}$  på  $1,1 \cdot 10^6$  år /Songsheng et al, 1997/. Med detta värde på halveringstiden blir halten  $^{79}\text{Se}$  i bränslet 15 ppb för den uppmätta aktiviteten.

I bränlekorrosionsexperimenten har, inom de experimentella felgränserna, ingen frigörelse av  $^{79}\text{Se}$  kunnat observeras. I karbonathaltigt vatten under oxiderande förhållanden är uranhalterna i storleksordningen  $10^{-5}$  M. Vid kongruent upplösning skulle selenhalten vara  $3 \cdot 10^{-9}$  M och  $^{79}\text{Se}$  skulle utgöra en tiondel av detta. Wilson /1990a/ rapporterar försök att radiometriskt analysera  $^{79}\text{Se}$  i experiment utförda under oxiderande förhållanden och anger en detektionsgräns för  $^{79}\text{Se}$  på 0,3 ng/ml. Detta motsvarar en selenhalt av  $4 \cdot 10^{-8}$  M. Med en halveringstid på  $1,13 \cdot 10^6$  år i stället för 65000 år blir den faktiska detektionsgränsen 5 ng/ml eller  $7 \cdot 10^{-7}$  M. Wilson konstaterar också att halterna  $^{79}\text{Se}$  är under eller kring detektionsgränsen, vilket är att förvänta med tanke på det låga seleninnehållet i bränslet.

Bruno et al /1997/ anger en löslighet för selen på mindre än  $10^{-9}$  M för reducerande förhållanden. Lösningsspecies är för oxiderande förhållanden selenat och för reducerande förhållanden  $\text{HSe}^-$ . Löslighetsbegränsande fasta faser är sekvensen från oxiderande förhållanden till reducerande förhållanden kalciumselenat, elementärt selen,  $\text{FeSe}_2$  och  $\text{FeSe}$ . Seleniderna har mycket låga lösligheter. Om selen har frigjorts genom oxidation kan det tänkas initialt föreligga som selenat. Kinetiken för reduktion av selenat till selenid kan vara mycket långsam. För analogen sulfatreduktion till sulfid sker reduktionen i naturliga vatten endast genom sulfatreducerande bakterier.

**Zirkonium:** Zirkonium finns i fast lösning i bränlematrisen och utgör cirka 0,5 procent av det bestrålade bränslet. Det frigörs i takt med bränleoxidationen/omvandlingen. Det är inte redoxkänsligt, men mycket svårlösligt. Bruno et al /1997/ rekommenderar en löslighet på cirka  $2,5 \cdot 10^{-9}$  M. Bidraget till zirkonium i lösning kommer med största sannolikhet att domineras av stabila isotoper från kapslingsrören och halterna radioaktivt zirkonium kommer att vara mycket små. I Studsviks serie 11, Forsyth /1997/ är halterna under detektionsgränsen, som ligger på cirka  $1 \cdot 10^{-9}$  M. Lösningsspecies är  $\text{Zr}(\text{OH})_4$  för alla pH av intresse och zirkoniumdioxid, troligen amorf, är löslighetsbegränsande fasta fas.

**Teknetium:** Huvuddelen av teknetium i bränslet ligger i metalliska inneslutningar. Frigörelsen av teknetium är indirekt beroende av upplösningen av bränlematrisen på så sätt att inneslutningarna exponeras för vatten i takt med att den omgivande bränlematrisen löses upp. När inneslutningarna är exponerade för vatten, är deras upplösning i stort oberoende av bränslets upplösning. Under reducerande eller anoxiska förhållanden har teknetium mycket låg löslighet, i storleken  $10^{-8}$  M /Bruno et al, 1997/. Detta värde stämmer relativt väl överens med vad som observerats i bränlekorrosionsexperiment /Forsyth och Werme, 1992/. De dominerande lösningsspecierna är  $\text{TcO}(\text{OH})_2$  med  $\text{TcO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$  som löslighetsbestämmande fast fas.

Under oxiderande förhållanden, då perteknetat,  $\text{TcO}_4^-$ , kan bildas kan lösligheten bli mycket hög och någon löslighetsbegränsning för teknetium har heller inte kunnat observeras i bränslekorrosionsexperiment /Forsyth och Werme, 1992; Wilson, 1990b/. I närvaro av Fe(II)-haltiga mineral kommer perteknetat att reduceras till Tc(IV) /Cui och Eriksen, 1996/. Korrosionsprodukterna (magnetit) på gjutjärnsinsatsen förväntas därför effektivt reducera eventuellt Tc(VII).

**Palladium:** På samma sätt som för teknetium ligger huvuddelen av palladium i bränsle i metalliska inklusioner och får förutsättas frigöras på ett analogt sätt. Av de palladium isotoper som bildats genom kärnklyvning, är endast  $^{107}\text{Pd}$  radioaktiv. Andelen  $^{107}\text{Pd}$  av hela palladiuminventariet motsvarar cirka 15 procent. Lösligheten för palladium är mycket låg; Bruno et al /1997/ ger ett värde i området  $10^{-8}$  till  $10^{-9}$  M. I Studsviks serie 11 /Forsyth, 1997/ är halterna under detektionsgränsen, som ligger på cirka  $2 \cdot 10^{-9}$  M.  $\text{Pd}(\text{OH})_2$  förväntas vara dominerande lösningsspecies och PdO är löslighetsbegränsande fasta fas /Bruno et al, 1997/.

**Tenn:** Andelen tenn i bränslet är omkring 160 ppm (50 MWd/kg U, PWR), varav cirka 25 procent utgörs av  $^{126}\text{Sn}$ . Liksom för  $^{79}\text{Se}$  skiljer sig beräknade och mätta  $^{126}\text{Sn}$  värden. Analyserna ger endast 20 procent av beräknat värde med Origen /MCC, 1988/. Även för  $^{126}\text{Sn}$  kan halveringstiden vara underskattad, men avvikelsen är till skillnad från  $^{79}\text{Se}$  bara en faktor 2 för låg /Haas et al, 1996; Shengdong Zhang et al, 1996/. I bränslekorrosionsexperimenten har inom de experimentella felgränserna ingen frigörelse av  $^{126}\text{Sn}$  observerats. Wilsons /1990a/ försök att analysera  $^{126}\text{Sn}$  gav för oxiderande förhållanden, som för  $^{79}\text{Se}$ , värden under eller nära detektionsgränsen. Som detektionsgräns anger Wilson 0,02 ng/ml, motsvarande en tennhalt av  $6 \cdot 10^{-10}$  M. Detta är av samma storleksordning, som lösligheten för tenn under reducerande förhållanden /Bruno et al, 1997/. Förväntade tennhalter i lösning utifrån mängden upplöst uran är i storleksordningen  $10^{-9}$  M.

Specieringen i lösning beror huvudsakligen på pH. Vid pH runt 8 dominerar  $\text{Sn}(\text{OH})_4$  medan vid pH 9  $\text{Sn}(\text{OH})_5^-$  dominerar. Löslighetsbegränsande fas är  $\text{SnO}_2$  /Bruno et al, 1997/.

**Neptunium:** Halten neptunium (huvudsakligen  $^{237}\text{Np}$ ) ökar med utbränningen och är för högutbränt bränsle med några tiotals års avklingning omkring 0,08 procent, och växer med tiden in till några tiondels procent. Neptunium i form av neptuniumdioxid förutsätts vara i fast lösning med urandioxiden och kommer att kunna lösas upp i takt med att urandioxiden löses upp eller omvandlas. För neptunium finns data från bränslekorrosionsexperiment under såväl oxiderande som anoxiska förhållanden. Wilson rapporterar för serie 2 /1990a/  $\log[M] = -8,6$  vid 25 °C och för serie 3 /1990b/  $\log[M] = -8,9$  vid 25 °C och  $\log[M] = -9,1$  vid 85 °C. Studsvik har för serie 11 en experimentserie utförd på en segmentstav med utbränning varierande från 21,2 till 49,0 MWd/kg U längs stavens längd, ett medelvärde för neptuniumhalten på  $\log[M] = -9,1$  för oxiderande förhållanden och  $\log[M] = -10,4$  för anoxiska förhållanden /Werme och Spahiu, 1998; Forsyth, 1997/. Halterna visar ingen korrelation med neptuniuminnehållet i bränsleproverna vilket skulle tyda på någon form av löslighetskontroll. Halterna för oxiderande förhållanden stämmer relativt väl överens med beräknade värden för reducerande förhållanden /Bruno et al, 1997/, medan för anoxiska förhållanden, de uppmätta halterna ligger två storleksordningar under beräknade halter.



För de redoxpotentialer och pH som råder i granitiska grundvatten är  $\text{Np}(\text{OH})_4$  dominerande lösningsspecies. Löslighetsbegränsande fasta fas är  $\text{Np}(\text{OH})_4(\text{am})$  /Bruno et al, 1997/. På liknande sätt som för teknetium kommer initialt oxiderat Np att reduceras till  $\text{Np}(\text{IV})$  på gjutjärnsinsatsens korrosionsprodukter /Cui och Eriksen, 1996/.

**Plutonium:** Andelen plutonium i bestrålat kärnbränsle ligger strax under en procent relativt oberoende av utbränning, eftersom kärnklyvningar av plutonium till stor del uppväger nyproduktionen redan vid måttlig utbränning. Plutonium förutsätts i form av plutoniumdioxid vara i fast lösning med urandioxiden och kommer att kunna lösas upp i takt med att urandioxiden löses upp eller omvandlas. För plutonium finns data från bränslekorrosionsexperiment under såväl oxiderande som anoxiska förhållanden. Wilson rapporterar för serie 2 vid 25 °C /1990a/  $\log[M] = -8,4$  för ett PWR bränsle med en utbränning på 30 MWd/kg U och  $\log[M] = -9,1$  för ett PWR bränsle med en utbränning på 27 MWd/kg U. För serie 3 /1990b/ är värdena  $\log[M] = -8,4$  vid 25 °C och  $\log[M] = -10,4$  vid 85 °C. I Studsviks serie 11 uppmättes ett plutoniummedelvärde på  $\log[M] = -8,6$  för oxiderande förhållanden och  $\log[M] = -10,1$  för anoxiska förhållanden /Werme och Spahiu, 1998; Forsyth, 1997/. Halterna för anoxiska förhållanden stämmer väl med beräknade halter /Bruno et al, 1997/. Bruno et al /1997/ ger  $\text{Pu}(\text{OH})_4$  som dominerade lösningsspecies för förhållanden som råder i granitiska grundvatten med  $\text{Pu}(\text{OH})_4(\text{am})$  som löslighetsbegränsande fas.

I tidigare experimentserier (serie 3 och 7) har plutoniumhalterna vid de första kontakterna varit ungefär en storleksordning högre än vad som uppmätts för senare exponeringar för vatten /Forsyth och Werme, 1992/. För serie 11 finns samma tendens, men mindre uttalad. För serie 3 och 7 var plutoniumhalterna,  $\log[M] = -9,1$ , för vattenkontakter efter de första 200 dagarna. Detta är något lägre än i serie 11, där motsvarande värde är  $\log[M] = -8,7$ . För bränsle med extremt låg utbränning, 0,5 MWd/ kg U, där plutoniuminnehållet är endast en procent av innehållet i normalt bränsle uppmättes halter av  $^{239}\text{Pu}$  på  $\log[M] = -8,9$  /Forsyth och Werme, 1992/. Detta värde stämmer väl med plutoniumhalter uppmätta i experiment med högre plutoniuminnehåll och skulle därför tyda på en löslighetsbegränsning för plutoniumfrigörelsen. För det lågutbrända bränslet är plutoniumhalten nära den kongruenta mängden för mängden upplöst uran. Det kan därför inte helt uteslutas att halten styrs av uranupplösningen. I avjoniserat vatten var plutoniumhalterna för serie 3 och 7  $\log[M] = -7,9$  /Forsyth och Werme, 1992/ och för serie 11  $\log[M] = -7,7$ . För serie 11 är endast 7 experiment med neutralt pH genomförda.

**Americium och curium:** Andelarna i bränslet av de trevärda aktiniderna americium och curium är utbränningsberoende och är cirka 0,09 procent respektive 0,02 procent för högutbränt bränsle (50 MWd/kgU /MCC, 1988/).

Americium är svårt att analysera i lösningar som varit i kontakt med bränsle, både radiometriskt och med masspektroskopi på grund av överlapp mellan  $^{241}\text{Am}$  och plutoniumisotoper. Wilson /1990a, 1990b/ analyserar americium radiometriskt efter separation och noterar den stora spridningen mellan data samt att filtreringen av lösningen kraftigt påverkade halterna. Wilsons slutsats är att huvuddelen av americium är partiklar eller kolloider. Detta är inte orimligt, eftersom det är känt att americium sorberar starkt. Wilson rapporterar halter på  $\log[M] = -9,8$  för 25 °C och  $\log[M] = -12,3$  för 85 °C i karbonathaltigt vatten.

Den med uran kongruenta mängden americium skulle ha givit halter på cirka  $\log[M] = -8$ . Bruno et al /1997/ beräknar americiums löslighet till  $10^{-7}$  M. De betydligt lägre uppmätta halterna tyder på att americium inte kan vara löslighetsbegränsad av en ren americiumfas. Det kan inte uteslutas att de mätta halterna är kraftigt påverkade av sorption.

Bruno et al /1997/ ger  $\text{Am}(\text{OH})_2^+$  eller  $\text{AmCO}_3^+$  som lösningsspecies beroende på karbonathalten i grundvattnet. Löslighetsbegränsande fas är  $\text{AmOHCO}_3$ .

Wilson /1990a, 1990b/ har bestämt curiumhalterna genom direkt alfaspektrometri. Curium uppför sig på liknande sätt som americium. Data sprider mycket och halterna påverkas starkt av filtreringar. Wilson anger ungefärliga halter för curium till  $\log[M] = -11,3$  för 25 °C och  $\log[M] = -14,2$  för 85 °C. Studsvik har rutinmässigt analyserat curium med alfaspektrometri, men resultaten utvärderas normalt inte. En preliminär rapportering av curiumhalter gjordes av Forsyth et al /1988/. Halterna var låga,  $\log[M] = -11,2$ , vilket stämmer väl överens med Wilsons data.

Bruno et al /1997/ ger  $\text{Cm}(\text{OH})_2^+$  som lösningsspecies och  $\text{CmOHCO}_3$  som löslighetsbegränsande fas.

**Kolloidbildning:** I experimenten i Studsvik har en andel av laklösningen från varje experiment filtrerats genom ett membranfilter, som endast släpper aggregat med storlek som är mindre än 15–20 Å. Syftet med filterningarna var att försöka bestämma andelen kolloider i laklösningarna. Det är oklart om materialet på filtret representerar kolloider. Den stora spridningen i data, från några mikrogram upp till hundra mikrogram, kan vara en indikation på att materialet på filtret domineras av större partiklar än kolloider /Forsyth, 1997/. Medianvärdet för uran kan uppskattas till att ligga kring cirka 20 µg/200 ml (0,1 ppm) att jämföra med några ppm för halterna uran i lösning för oxiderande förhållanden. För anoxiska förhållanden är mängden data mindre och medianvärdet ligger också något lägre. Mängderna uran på filtren och i lösning är jämförbara och i storleksordningen tiotals ppb.

### **Tidsperspektiv**

Under hela förvarets livstid.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Beräkningar av lösligheter för tillämpning i säkerhetsanalys görs alltid med en visst mått av pessimism och är alltså aldrig ett försök att simulera verkliga system. Avsikten är istället att bestämma en försvarbar övre gräns för lösligheten av elementet ifråga, utifrån kända och väl definerade löslighetsbegränsande faser. De modelleringar som görs är däremot realistiska simuleringar av de givna indatuppsättningarna.

I Bruno et al /1997/ diskuteras osäkerheterna i de framräknade lösligheterna med avseende på indata. Det är framför allt redoxförhållanden, pH, karbonathalt och temperatur som påverkar lösligheten. Vissa radioelements löslighet påverkas inte alls av rimliga variationer av dessa parametrar, men de flesta påverkas av åtminstone någon. Förutom osäkerheter i indata diskuteras också osäkerheter i den använda termodynamiska databasen samt osäkerheterna i de beräkningsprogram som används för beräkningarna.

## Hantering i säkerhetsanalysen

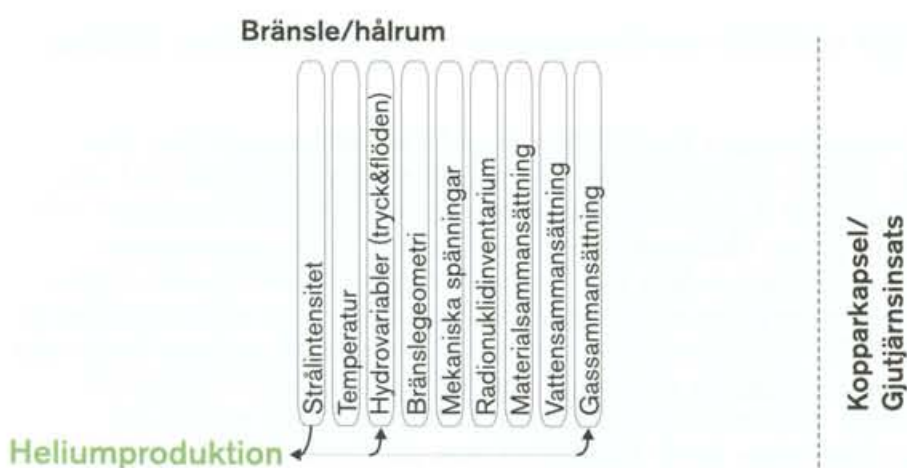
**Basscenario:** Inte relevant.

**Kapseldefektscenario:** Lösligheter enligt Andersson /1999/ används. Dessa är extra-herade ur Bruno et al /1997/.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Effekterna av modifierade grundvattenkemiska förhållanden kan behöva utredas. Annars: Se basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

### 2.7.9 Heliumproduktion



Figur 2-16. Heliumproduktion.

#### Överblick, allmän beskrivning

$\alpha$ -partiklar (heliumkärnor) från  $\alpha$ -sönderfall i bränslet bildar gasformigt helium sedan de bromsats i bränslematrisen. Kring en bränslestav med intakt kapslingsrör leder detta till en tryckuppbyggnad innanför röret, som i sin tur kan leda till mekaniskt rörbrott, se avsnitt 2.6.1. Om kapslingsrören är skadade uppstår en försumbar tryckökning i kapselns hålrums.

#### Modellstudier/experimentella studier

Tryckökningen ligger i området 10 till 20 MPa på 100 000 år beräknat på en tomvolym av 20 cm<sup>3</sup>. Om detta övertryck leder till brott på kapslingsrören skulle tryckökningen i tomrummet i kapseln bli i storleksordningen 0,1 MPa, vilket är helt försumbart.

#### Tidsperspektiv

Heliumuppbyggnaden pågår kontinuerligt, så länge det finns uran kvar i bränslet.

### Naturliga analogier

Inte relevant.

### Sammanfattning av osäkerheter

Inga konceptuella osäkerheter.

Osäkerheterna gäller när kapslingsrörsbrott sker på grund av tryckuppbyggnaden. Tryckuppbyggnaden är långsam samtidigt som Zirkaloykapslingen åldras.

### Hantering i säkerhetsanalysen

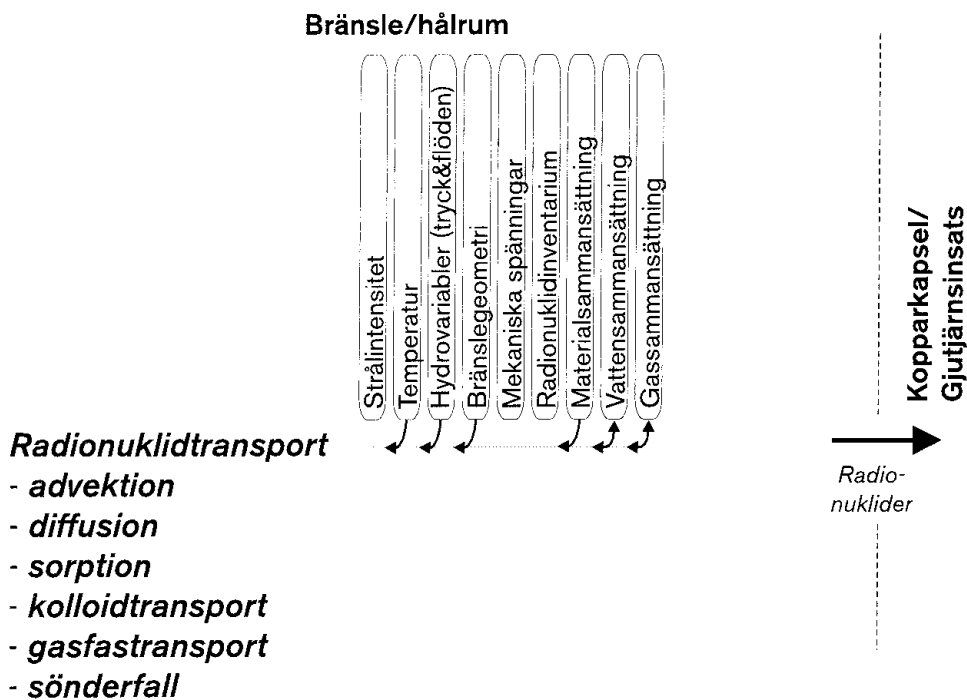
**Basscenario:** En pessimistisk ansats är att alla bränslestavar har en så stor skada att helium kan läcka ut till tomrummet i kapselinsatsen.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenario.

**Klimatförändringar:** Se basscenario.

**Jordskalv:** Se basscenario.

## 2.8 Radionuklidtransport



Figur 2-17. Radionuklidtransport i bränsle/kapsel.

## **Överblick, allmän beskrivning**

Om vatten tränger in i en skadad kapsel startar korrosion av gjutjärnsinsats och bränslet metalldelar, se avsnitt 3.7.1 respektive 2.7.4. Utvecklingen kan med tiden leda till att vatten kommer i kontakt med bränslet och därmed till att radionuklider frigörs som vattenlösta specier eller kolloider, avsnitten 2.7.5 och 2.7.8. Radionuklider finns även i bränslets metalldelar och frigörs då dessa korroderar.

Frigjorda radionuklider kan transporteras i kapselns inre och tränga ut genom ett skadat kopparkhölje. Radionuklider som lösts i vatten inuti kapseln kan transporteras antingen genom att följa med i vattnets eventuella rörelser, *advektion*, eller genom att *diffundera* i vattnet. Transport i vatten är det dominerande transportsättet för radionuklider. Vissa nuklider kan förekomma i gasform i kapseln och kan då också *transporteras i gasfas*. Det gäller framförallt C-14, Rn-222 och Kr-85.

Transportvägarnas geometri i en skadad kapsel bestäms av kapselns och bränslets ursprungliga geometri samt av de förändringar korrosionen lett till. För att vatten ska komma i kontakt med bränsle och möjliggöra frigörelse och transport av radionuklider krävs genomgående skador hos såväl gjutjärnsinsats som Zirkaloykapsling. Även om sådana skador uppkommit kan kvarvarande strukturer förväntas utgöra betydande transporthinder, både för inflöde av vatten, avsnitt 2.5.1, och för uttransport av vattenlösta nuklider. Strukturen hos såväl de fyra meter långa kapslingsrören, bränslets övriga metalldelar, gjutjärnsinsatsen och kopparkapseln hindrar en effektiv transport. Även produkter från framförallt korrosionen av gjutjärnsinsatsen kan förväntas försvåra transport. Ytorna hos samtliga dessa strukturer kan också ha goda *sorptionsegenskaper* för vissa radionuklider.

## **Modellstudier/experimentella studier**

Inga direkta studier av radionuklidtransport för de förhållanden som förväntas i en skadad kapsel är kända. Den generella kunskapen om delprocesser som advektion, diffusion och sorption är dock god och processerna väl studerade.

## **Tidsperspektiv**

Efter att en skada uppkommit i kopparkhöljet är radionuklidtransport i kapselns inre en relevant process i alla säkerhetsanalysens tidsperspektiv.

## **Osäkerheter**

Osäkerheterna kring framförallt vatten/gasomsättning i kapselns inre, avsnitt 2.5.1, kring korrosion av gjutjärnsinsatsen, avsnitt 3.7.1, och av bränslets metalldelar, avsnitt 2.7.4 är stora. En bedömning av bland annat de geometriska förhållandena och därmed transportvägarnas geometri blir därför också osäker. Även sorptionsegenskaperna hos materialen i en skadad kapsel är svårbedömda.

Radionuklidtransport i kapselns inre förenklas därför pessimistiskt i säkerhetsanalysen, se nedan.

## **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Inte relevant.

**Kapseldefektscenario:** Radionuklidtransport i kapselns inre förenklas vid modellering på följande sätt: Efter att en bestämd skadestid förflutit sedan en skada på kapselns kopparhölje uppkommit antas hela kapselns inre tomrum vid förslutning, ca 1 m<sup>3</sup>, vara fyllt med vatten. Karenstidens storlek bedöms med ledning av storleken på skadan i kopparhöljet och den påföljande vattenomsättningen och korrosionen.

Allt vatten i kapseln antas efter karenstiden vara tillgängligt för bränsleupplösningssprocessen, dvs stå i direkt kontakt med allt bränsle utan att hindras av Zirkaloykapsling eller andra strukturer. Vattnet antas vara ständigt omrört, dvs inga koncentrationskillnader råder mellan olika delar i kapselns inre. Bränsleupplösningssprocessen bestämmer därefter frigörelsetakten för matrisbundna radionuklider. Segregerade nuklider samt radionuklider i bränslets strukturdelar antas vara tillgängliga för vattenlösning omedelbart efter karenstidens slut. Sorption av radionuklider till kapselns inre delar försummas.

Transport av radionuklider genom skadan i kopparhöljet modelleras som diffusion med antagande om skadans geometri.

Modelleringen genomförs med transportmodellen COMP23 /Romero et al, 1999/, integrerat med modellering av bränsleupplösning, utfällning/lösning av löslighetsbegränsade radionuklider samt kedjesönderfall. Även transport genom buffert/återfyllning och ut till omgivande geosfär hanteras i samma modell.

Buffertens mikroporer förväntas hindra all transport av kolloider ut från kapselns inre. Kolloidtransport i kapselns inre hanteras därför inte förutsatt att bufferten helt omger kapseln.

Radionuklidtransport i gasfas hanteras med överslagsberäkningar.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Om effekterna av ett jordskalv dessutom leder till att bufferten inte längre helt omger en skadad kapsel måste även transport av bränslekolloider diskuteras.

## 2.9 Referenser

- Andersson, J, 1999.** SR 97 – Data and data uncertainties. Compilation of data and evaluation of data uncertainties for radionuclide transport calculations. SKB TR-99-09, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Barner J O, Cunningham M E, Freshley M D, Lanning D D, 1993.** Evaluation of fission gas release in high-burnup light water reactor fuel rods. Nucl. Techn. 102, 210–231.
- BEFAST III, 1997.** Further analysis of extended storage of spent fuel. Final report of a Co-ordinated Research Programme on the Behaviour of Spent Fuel Assemblies during Long-term Storage (BEFAST III) 1991–1996. IAEA TECDOC-944.
- Bjurström H, Bruce A, 1997.** Temperaturer i en kapsel enligt TR 95-02, en första uppskattning. SKB Inkapsling PPM 97-3420-28, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Bjurström H, Bruce A, 1998.** Temperaturer i en kapsel enligt TR 95-02, etapp 2. SKB Inkapsling PPM 98-3420-30, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Blackwood D J, Naish C C, Platts N, Taylor K J, Thomas M I, 1995.** The anaerobic corrosion of carbon steel in granitic groundwaters. SKB Inkapsling PR 95-03, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Bond A E, Hoch A R, Jones G D, Tomczyk A J, Wiggin R W, Worraker W J, 1997.** Assessment of a spent fuel disposal canister. Assessment studies for a copper canister with cast steel inner component. SKB TR 97-19, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Bruno J, Sellin P, 1992.** Radionuclide solubilities to be used in SKB 91. SKB TR 92-13, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Bruno J, Cera E, de Pablo J, Duro L, Jordana S, Savage D, 1997.** Determination of radionuclide solubility limits to be used in SR 97. Uncertainties associated to calculated solubilities. SKB TR 97-33, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Börgesson L, 1990.** Some aspects of the water intrusion scenario for the Advanced Cold Process Canister. SKB AR 90-12, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Casas I, Gimenez J, Marti V, Torrero M E, de Pablo J, 1993.** Kinetically controlled dissolution of  $UO_2(s)$  under oxidizing conditions. A combined dissolution-oxidation model. Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 294, p 61–66.
- Christensen H, Bjergbakke E, 1982.** Radiolysis of groundwater from HLW stored in copper canisters. SKBF/KBS TR 82-02, Svensk Kärnbränsleförsörjning AB.
- Christensen H, Bjergbakke E, 1984.** Radiolysis of concrete. SKBF/KBS TR 84-02, Svensk Kärnbränsleförsörjning AB.
- Cui D, Eriksen T E, 1996.** Reduction of Tc(VII) and Np(V) in solution by ferrous iron. A laboratory study of homogeneous and heterogeneous redox processes. SKB TR-96-03, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Efrainsson H, 1996a.** Kriticitetsberäkningar för kapsel med gjutstålsinsats för slutförvaring av LWR-bränsle. SKB Inkapsling PPM 95-3430-04, Rev.1, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Efrainsson H, 1996b.** Kriticitetsberäkningar och parameterstudier för slutförvarskapsel med insats. SKB Inkapsling PPM 96-3430-06, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Eklund U-B, Forsyth R, 1978.** Lakning av bestrålat UO<sub>2</sub>-bränsle. KBS TR 70, Kärnbränslesäkerhet.

**Eriksen T, 1996.** Radiolysis of water within a ruptured fuel element. SKB Utveckling PR U-96-29, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Forsberg K, He N, Masih A R, 1996.** Probabilistic analysis of nuclear fuel rod behavior using a quasi-Monte Carlo method. Nucl. Sci. and Eng. 122, 142–150.

**Forsström H, 1982.** Hantering och slutförvaring av plutoniumberikat bränsle (Mox-bränsle) SKBF/KBS AR 82-33, Svensk Kärnbränsleförsörjning AB.

**Forsyth R S, Mattsson O, Schrire D, 1988.** Fission product concentration profiles (Sr, Xe, Cs and Nd) at the individual grain level in power-ramped LWR fuel. SKB TR 88-24, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Forsyth R S, Werme L O, Bruno J, 1988.** Preliminary study of spent UO<sub>2</sub> fuel corrosion in the presence of bentonite. J. Nucl. Mater. 160, 218–223.

**Forsyth R S, Jonsson T, Mattsson O, 1990.** Examination of reaction products on the surface of UO<sub>2</sub> fuel exposed to reactor coolant water during power operation. SKB TR 90-07, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Forsyth R S, Werme L O, 1992.** Spent fuel corrosion and dissolution. J. Nucl. Mater. 190, pp 3–19.

**Forsyth R S, Eklund U-B, Werme L O, 1994.** A study of fission product migration and selective leaching by means of a power-bump test. Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 333, 385–390.

**Forsyth R S, 1995.** Spent nuclear fuel. A review of properties of possible relevance to corrosion processes. SKB TR 95-23, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Forsyth R S, 1996.** Collected experimental data for the BTC/PTC experiments. Study of the Tc-99 source term for the BWR and PWR reference fuels. SKB AR 94-07, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Forsyth R, 1997.** The SKB Spent Fuel Corrosion Programme. An evaluation of results from the experimental programme performed in the Studsvik Hot Cell laboratory. SKB TR 97-25, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Fuger J, 1993.** Problems in the thermodynamics of the actinides in relation with the back-end of the nuclear fuel cycle. J. Nucl. Mater. 201 (1993) 3–14.

**Gdowski G E, Bullen D B, 1988.** Survey of degradation modes of candidate materials for high-level radioactive-waste disposal containers – Oxidation and corrosion. Report UCID-21362 Vol. 2. Lawrence Livermore National Laboratory, University of California, Livermore, California, USA.

**Gray W J, Strachan D M, Wilson C N, 1992.** Gap and grain boundary inventories of Cs, Tc, and Sr in spent LWR fuel. Mat. Res. Soc. Symp. Vol. 257, 353–360. Materials Research Society, Pittsburgh, USA.



**Gray W J, Thomas L E, Einziger R E, 1993.** Effects of air oxidation on the dissolution rate of LWR spent fuel. *Mat. Res. Soc. Symp. Vol. 294*, 47–54. Materials Research Society, Pittsburgh, USA.

**Gray W J, Steward S A, Shoesmith D W, Tait J C, 1994.** Interlaboratory comparison of  $\text{UO}_2$  dissolution rates. *Proc. 5<sup>th</sup> Annual High-Level radioactive Waste management Conf. (Waste Management '94)* 4, 2597–2601.

**Gray W J, 1998.** Spent fuel dissolution rates as a function of burnup and water chemistry. Pacific Northwest Laboratory, Report PNNL-11895, UC-802.

**Grigoriev V, 1996.** Hydrogen embrittlement of zirconium alloys. Studsvik Material, Report STUDSVIK/M-96/73.

**Haas P, Gartenmann P, Golser R, Kutschera W, Suter M, Synal H-A, Wagner M J M, Wild E, Winkler G, 1996.** A new half-life measurement of the long-lived fission product  $^{126}\text{Sn}$ . *Nucl. Instr. And Meth. B 114*, pp 131–137.

**Hallstadius L, Grapengiesser B, 1991.** Progress in understanding high burnup phenomena. In: IAEA Technical Committee Meeting on Fuel Performance at High Burnup for Water Reactors. Studsvik 1990. IAEA, IWGFPT-36, 52–57.

**Henshaw J, Hoch A, Sharland S M, 1990.** Further assessment studies of the Advanced Cold Process Canister. AEA Decommissioning & Radwaste, AEA D&R 0060.

**Henshaw J, 1994.** Modelling of nitric acid production in the Advanced Cold Process Canister due to irradiation of moist air. SKB TR 94-15, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Hocking W H, Duclos A M, Johnson L H, 1994.** Study of fission-product segregation in used CANDU fuel by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) II. *J. Nucl. Mater.* 209, 1–26.

**Håkansson R, 1996.** Beräkning av nuklidinnehåll, resteffekt, aktivitet samt doshastighet för utbränt kärnbränsle. Studsvik Arbetsrapport N(R)-96/079.

**Johnson L H, 1982.** The dissolution of irradiated  $\text{UO}_2$  fuel in groundwater. Atomic Energy of Canada Limited Report, AECL-6837.

**Johnson L H, Leneveu D M, King F, Shoesmith D W, Kolar M, Oscarson D W, Sunder S, Onofrei C, Crosthwaite J L, 1996.** The disposal of Canada's nuclear fuel waste: A study of post-closure safety of in-room emplacement of used CANDU fuel in copper containers in permeable plutonic rock. Volume 2: Vault model. Atomic Energy of Canada Limited Report, AECL-11494-2, COG-95-552-2.

**Johnson L H, Tait J C, 1997.** Release of segregated nuclides from spent fuel. SKB TR 97-18, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Koizumi S, Umehara H, Wakashima Y, 1991.** Study on fission gas release from high burnup fuel. In *Fuel Performance at High Burnup for Water Reactors. Proceedings of an IAEA Technical Committee Meeting, Studsvik, June 1990.* International Atomic Energy Agency, Vienna, IWGFPT/36, 102–109.

**Marsh G P, 1990.** A preliminary assessment of the advanced cold process canister. AEA Technology, Report AEA-InTec-0011.

**Massih A R, 1997.** Personligt meddelande.

**Mattsson H, Olefjord I, 1984.** General corrosion of Ti in hot water and water saturated bentonite clay. SKB/KBS TR 84-19, Svensk Kärnbränsleförsörjning AB.

**Mattsson H, Olefjord I, 1990.** Analysis of oxide formed on titanium during exposure in bentonite clay. I. The oxide growth. *Werkstoffe und Korrosion* **41**, 383–390.

**Mattsson H, Li C, Olefjord I, 1990.** Analysis of oxide formed on titanium during exposure in bentonite clay. II. The structure of the oxide. *Werkstoffe und Korrosion* **41**, 578–584.

**MCC (Materials Characterization Centre), 1988.** Characterization of spent fuel approved testing material – ATM-106-Pacific Northwest Laboratory, Report PNL-5109-106, UC-70.

**Northwood D, Kosasih U, 1983.** Hydrides and delayed hydrogen cracking in zirconium and its alloys. *Int. Metals Reviews* **28**, 92–121.

**Oversby V M, 1996.** Criticality in a high level waste repository. A review of some important factors and an assessment of the lessons that can be learned from the Oklo reactor. SKB TR 96-07, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Oversby V M, 1998.** Criticality in a repository for spent fuel: lessons from Oklo. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* Vol. 506, p 781.

**PLAN-rapport 98, 1998.** Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Renström P, 1997.** Calculation of the fuel temperature in vacuum storage canisters made of copper with cast steel inserts. SKB Inkapsling PPM 97-3420-23, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Romero L, Thompson A, Moreno L, Neretnieks I, Widén H, Boghammar A, Thompson A, 1999.** Compartment Model “NUCTRAN” (User’s Manual) SKB R-99-xx (under utarbetande).

**Rothman A J, 1984.** Potential corrosion and degradation mechanisms of Zircaloy cladding on spent fuel in a tuff repository. Lawrence Livermore National Laboratory rapport UCID-20172.

**Schrire D, Matsson I, Grapengiesser B, 1997.** Fission gas release in ABB SVEA 10x10 BWR fuel. *Proc. Int. Top. Meet. LWR Fuel Perform.* 104–117. American Nuclear Society, La Grange Park, Il.

**Shengdong Z, Jingru G, Anzhi C, Daming L, Daming L, 1996.** Measurement of the half life of <sup>126</sup>Sn using a radiochemical method. *J. Radioanal. Nucl. Chem., Letters* **212**(2), pp 93–99.

**Smart N, Rance A, Blackwood D, 1997.** Corrosion aspects of the copper-steel/iron process canister; consequences of changing the material for the inner container from steel to cast iron. SKB Inkapsling PR 97-04, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Songsheng J, Jingru G, Shan J, Chungsheng L, Anzhi C, Ming H, Shaoyung W, Shilin L, 1997.** *Nucl. Instr. and Meth. B* **123**, pp 405–409.

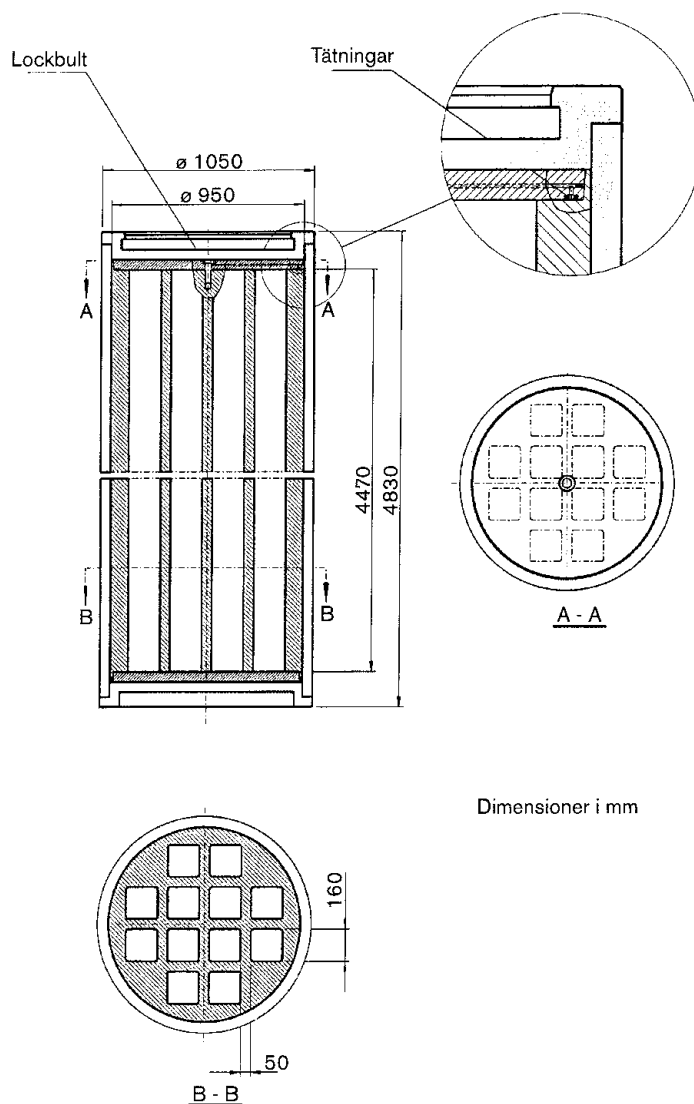
- Spinks J W T, Woods R J, 1990.** An introduction to radiation chemistry. 3rd edition. New York, NY (USA). John Wiley and Sons Inc.
- Stroes-Gascoyne S, Johnson L H, Sellinger D M, 1987.** The relationship between gap inventories of stable Xenon,  $^{137}\text{Cs}$ , and  $^{129}\text{I}$  in used CANDU fuel. Nuclear Technology 77, 320–330.
- Stroes-Gascoyne S, 1996.** Measurements of instant-release source terms for  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{90}\text{Sr}$ ,  $^{99}\text{Tc}$ ,  $^{129}\text{I}$  and  $^{14}\text{C}$  in used CANDU fuels. J. Nucl. Mater. 238, 264–277.
- Thomas L E, Charlot L A, Engelhard M H, 1988.** Auger analysis of grain boundaries in LWR spent fuel. Pacific Northwest Laboratory, opublicerade resultat.
- Thomas L E, Guenther R J, 1989.** Characterization of low-gas-release LWR fuels by transmission electron microscopy. Mat. Res. Symp. Proc. Vol. 127, 293-300. Materials Research Society, Pittsburgh, USA.
- Torrero M E, 1995.** Estudio de la disolución del  $\text{UO}_2$  como análogo químico de la matriz del combustible nuclear gastado. Doktorsavhandling, Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona.
- van Konynenburg R A, 1994.** Behavior of carbon-14 in waste packages for spent fuel in a tuff repository. Waste Management, v. 14, 363–383.
- Werme L O, Forsyth R S, 1988.** Spent  $\text{UO}_2$  fuel corrosion in water; release mechanisms. Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol 112, 443–452.
- Werme L O, Spahiu K, 1998.** Direct disposal of spent nuclear fuel: Comparison between experimental and modelled actinide solubilities in natural waters. J. Alloys and Compounds 271–273, 194–200.
- Wersin P, Bruno J, Spahiu K, 1993.** Kinetic modelling of bentonite-canister interaction. Implications for Cu, Fe and Pb corrosion in a repository for spent nuclear fuel. SKB TR 93-16, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Wikramaratna R S, Goodfield M, Rodwell W R, Nash P J, Agg P J, 1993.** A preliminary assessment of gas migration from the copper/steel canister. SKB TR 93-31, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Wilson C N, 1990a.** Results from NNWSI series bare fuel dissolution tests. Pacific Northwest Laboratory, Report PNL-7169, UC-802.
- Wilson C N, 1990b.** Results from NNWSI series 3 spent fuel dissolution tests. Pacific Northwest Laboratory, Report PNL-7170, UC-802.

### 3 Gjutjärnsinsats/kopparkapsel

#### 3.1 Beskrivning av gjutjärnsinsats och kopparkapsel

##### 3.1.1 Allmänt

Kapseln består av en inre behållare av gjutjärn och ett hölje av koppar, figur 3-1. Gjutjärnsinsatsen ger mekanisk stabilitet och kopparhöljet skyddar mot korrosion i förvarsmiljön. Kopparhöljet är 5 cm tjockt och kapseln har formen av en cirka 4,8 meter hög cylinder med en diameter av 1,05 meter.



Figur 3-1. Kopparkapsel med gjutjärnsinsats.

Insatsen har kanaler där bränsleelementen placeras och finns i två utformningar; en för 12 BWR-element och en för 4 PWR-element. Bränslekanalerna tillverkas i form av en kassett av kvadratiska rör. Därefter tillverkas innerbehållarens väggar och botten genom att kringgjuta kassetten med segjärn.

Kopparkapseln tillverkas antingen av heldragna sömlösa rör eller genom att samman-svetsa två rörhalvor av valsad plåt. En botten fästs med elektronstrålesvets på så sätt att svetsen kan undersökas med ultraljud och röntgenradiografi.

Efter att bränsle deponerats i kapseln försluts insatsen med ett O-ringstätat lock som fästs med bult. Därefter fästs kopparhöljets lock med elektronstrålesvets och tätheten kontrolleras med ultraljud och röntgenradiografi.

Kapseln väger totalt cirka 25 ton fylld med 12 BWR-element. En kapsel rymmer cirka två ton bränsle. I SR 97 antas att cirka 8 000 ton bränsle ska deponeras vilket alltså svarar mot cirka 4 000 kapslar.

### 3.1.2 Överblick av variabler

Systemdelen gjutjärnsinsats/kopparkapsel beskrivs geometriskt av **kapselgeometrin**.

Gjutjärnsinsats och kopparkapsel karakteriseras strålmässigt av **strålintensiteten** (främst  $\gamma$ - och neutronstrålning) samt termiskt av **temperaturen**. **Mekaniska spänningar** och **materialsammansättningar** för insats och kapsel karakteriserar systemdelen mekaniskt respektive kemiskt.

Variablerna definieras i tabell 3-1.

**Tabell 3-1. Variabler i kopparkapsel/gjutjärnsinsats.**

<b>Geometri</b>	Geometrisk mått för kapselkomponenterna. Här ingår även en beskrivning av eventuella tillverkningsfel vid svetsning o dyl.
<b>Strålintensitet</b>	Intensitet av $\alpha$ -, $\beta$ -, $\gamma$ - och neutronstrålning som funktion av tid och rum i kapselkomponenterna.
<b>Temperatur</b>	Temperatur som funktion av tid och rum i kapselkomponenterna.
<b>Mekaniska spänningar</b>	Mekaniska spänningar som funktion av tid och rum i kapselkomponenterna.
<b>Material-sammansättning</b>	Materialsammansättning hos kapselkomponenterna.

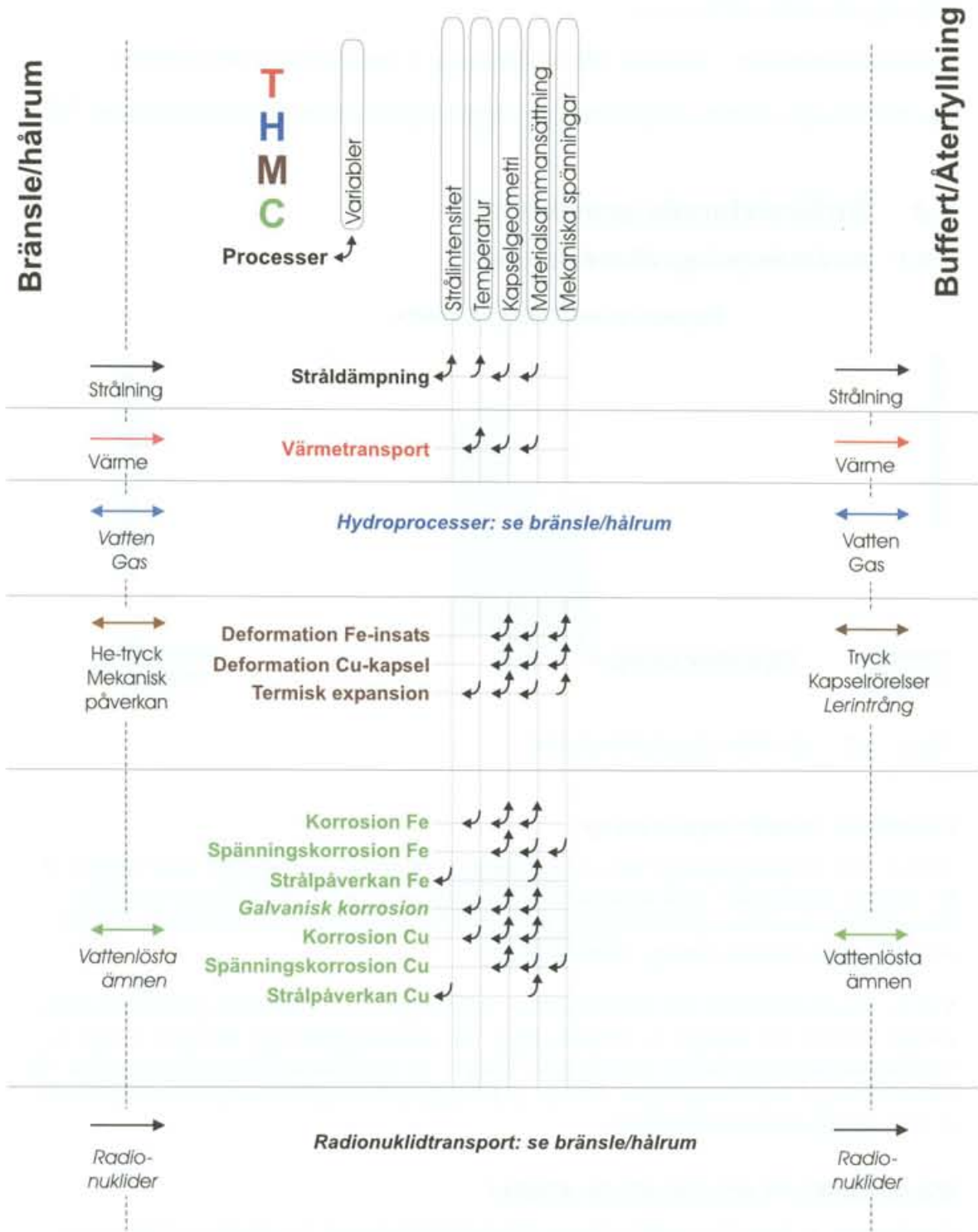
## 3.2 Översikt av processer

Genom *stråldämpning* i kapselmaterialet omvandlas en del av strålningen som tränger ut till kapseln till värmeenergi. *Värmetransport* sker genom ledning inom insats och kapsel samt till stor del genom strålning mellan dessa två delar.

Hydrauliska processer kan ske i hålrummen som finns mellan kapsel och bränsle och mellan gjutjärnsinsats och kopparkapsel och behandlas i systemdelen bränsle/hålrum.

Mekaniskt kan insats och kapsel *deformeras* av yttre laster. Dessutom förekommer *termisk expansion* som bl a leder till att hålrummet mellan insats och kapsel förändras.

# Kopparkapsel/Gjutjärnsinsats



Figur 3-2. THMC-diagrammet för gjutjärnsinsats/kopparkapsel. Processer i kursiv stil förekommer endast då kopparkapselns isolering är bruten.

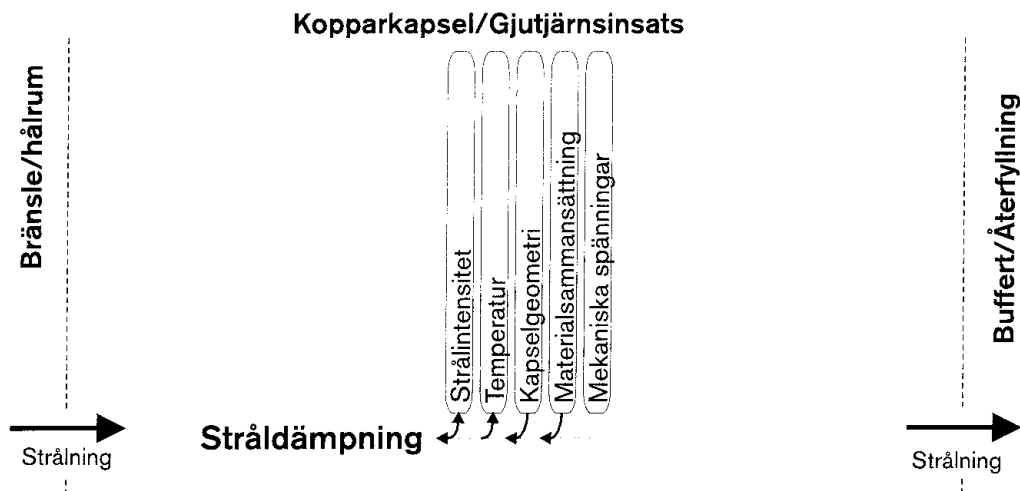
En viktig kemisk process är utvändigt *kopparkorrosion*, även *spänningskorrosion* skulle kunna förekomma i såväl kopparkapsel som gjutjärnsinsats. Materialen kan förändras av *strålpåverkan*. Om vatten tränger in sker *korrosion av gjutjärnsinsatsen* med åtföljande vätgasbildning och *galvanisk korrosion*.

Radionuklidtransport i kapselns hålrum behandlas i systemdelen bränsle/hålrum.

Det fullständiga THMC-diagrammet för kopparkapsel/gjutjärnsinsats visas i figur 3-2.

### 3.3 Strårelaterade processer

#### 3.3.1 Stråldämpning/värmealstring



Figur 3-3. Stråldämpning/värmealstring

#### Överblick, allmän beskrivning

Den  $\gamma$ - och neutronstrålning från de radioaktiva sönderfallen i bränslet som tränger ut till kapseln växelverkar med materialen i gjutjärnsinsats och kapsel. Energi överförs därvid till materialen och strålningen dämpas. Huvuddelen av den överförda energin omvandlas till termisk energi; värmealstring.

Vid  $\alpha$ - och  $\beta$ -sönderfall blir huvuddelen av strålningen kvar i bränslet genom att strålningen till stor del dämpas av bränsle självt. För gammastrålningen kommer en del av överskottsenergin att lämna bränslet och dämpas av kapselmaterialen och ge upphov till värmealstring i kapselmaterialiet. Denna andel uppskattas utgöra mindre än 10 procent av den totala värmeutvecklingen.

#### Modellstudier/experimentella studier

Beräkningar av kapselns stråldämpning (dosratsberäkningar) har gjorts av Håkansson /1995a, 1996/.

#### Tidsperspektiv

Till en början domineras  $\gamma$ -strålning av sönderfall av  $^{90}\text{Sr}$  och  $^{137}\text{Cs}$ . Dessa isotoper har en halveringstid på cirka 30 år, det vill säga strålintensiteten halveras vart 30:e år.

## Naturliga analogier

Inte relevant.

## Sammanfattning av osäkerheter

Såväl grundläggande förståelse som tillgång på data är tillräckliga för säkerhetsanalysens behov.

## Hantering i säkerhetsanalysen

**Basscenario:** Beräkningar av strålskärningen i kapseln. Värmealstringen i kapselmaterialet har ingen betydelse för temperaturfördelningen i närområdet kort efter deponeringen och framåt.

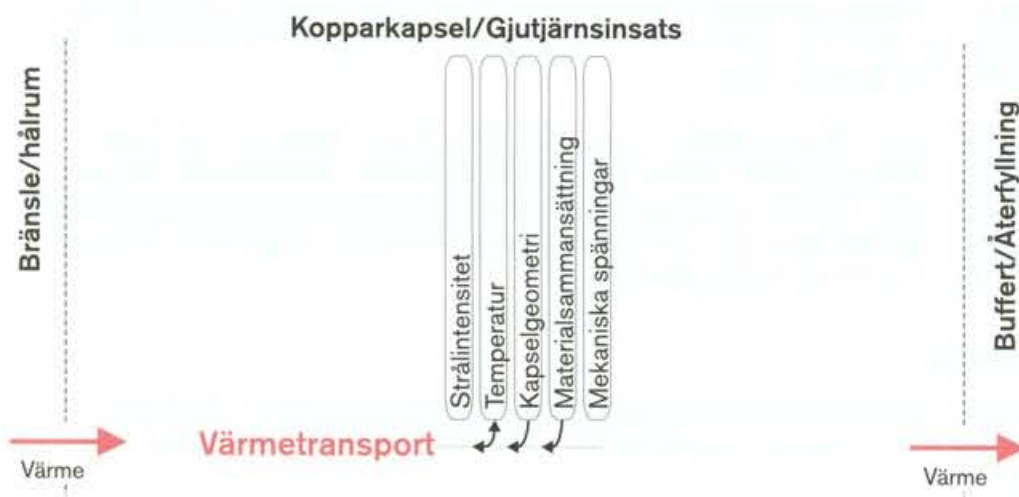
**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

## 3.4 Termiska processer

### 3.4.1 Värmetransport



Figur 3-4. Värmetransport.

## Överblick

Värme transporteras i metallen i gjutjärnsinsats och kopparkapsel genom ledning. Överföringen från stål till koppar sker framför allt genom strålning. Processen styrs av och påverkar temperaturfördelningen i materialen. Värmeflödet mot angränsande systemdelar (bränsle och buffert) utgör randvillkor. Processen är en del av förvarets termiska utveckling.



## **Allmän beskrivning och modellstudier/experimentella studier**

Kapseln förutsätts förslutas antingen med restluften i kapseln eller efter evakuering av restluften. Detta innebär att värmeöverföringen från bränsleknippen till gjutjärnsinsats sker genom värmeledning och strålning eller enbart genom strålning. Mellan gjutjärnsinsats och kopparkapsel sker värmeöverföringen genom strålning, eftersom elektronstrålesvetsningen förutsätter vakuum i detta utrymme, och värmeledning genom bottenkontakten mellan insats och kopparkapsel.

Temperaturberäkningar har genomförts för de olika situationer kapseln kommer att utsättas för under hanteringen från förslutning av locket till deponering /Renström, 1997; Bjurström och Bruce 1997, 1998/. Värmeledningen i järn och koppar är så god att mycket små temperaturskillnader uppstår inom metallkomponenterna.

Det största temperatursprånget mellan komponenterna i kapseln förväntas mellan kapselinsatsen och kopparkapseln. Eftersom värmeöverföringen sker genom strålning blir den mycket beroende av kopparytans tillstånd.

Beräkningar utfördes med det försiktiga antagandet att den totala effektutvecklingen i kapseln genom radioaktivt sönderfall var 2855 W, som motsvarar en utbränning av 55 MWd/kgU och en avklingningstid av 30 år /Knopp, 1996/.

För beräkningar där det endast togs hänsyn till det radiella värmeflödet var yttemperaturen på bränslestavarna upp till 405 °C. Temperaturen på kapselinsatsen var över 370 °C om yttemperaturen på kapseln sattes till 90 °C och emissiviteten för kopparytan antogs vara 0,03. Denna emissivitet motsvarar en slät och ren kopparyta. Om emissiviteten antogs vara 0,10 var motsvarande temperaturer omkring 300 °C på bränslet och omkring 265 °C på kapselinsatsen.

Om hänsyn togs även till värmeflödet i axiell led, det vill säga kylningen av kapselinsatsen genom bottenkontakten mellan kapsel och insats, blev motsvarande temperaturer på bränsle cirka 350 °C respektive cirka 280 °C för emissiviteterna 0,03 och 0,10. Temperaturen i kapselinsatsen kom att variera i axiell led mellan drygt 90 °C i botten upp till 300 °C i toppen för emissiviteten 0,03.

## **Tidsperspektiv**

Värmealstringen halveras den första tiden efter förslutning vart 30:e år. De högsta temperaturerna och de största värmeflödena får man kort tid efter deponering och förslutning.

## **Naturliga analogier**

Inte relevant.

## **Sammanfattning av osäkerheter**

Antaganden om kopparytans emissivitet (materialets förmåga att utsända elektromagnetisk strålning) är helt avgörande för beräkningsresultatet. En slät och ren kopparyta har en emissivitet på 0,03. En fördubbling av emissiviteten skulle leda till en temperatursänkning på bränslekapslingen med 70 °C. Med den modell som använts styrs resultatet helt av antagandet om koppars emissivitet. Även beräkningar där hänsyn tagits till värmeövergången genom bottenkontakten mellan insats och kopparkapsel visar att de antaganden som görs beträffande koppars emissivitet är avgörande för beräkningsresultatet.

Den stora osäkerheten när det gäller temperaturberäkningarna ligger i antagandena om värmeövergången mellan kopparytan på kapseln och bufferten i deponeringshålet innan vattenmättnad. En rimlig uppskattning av temperaturfördelningen i bränsle och kapsel kräver en bättre kunskap om värmeöverföringen mellan kapsel och buffert under vattenmättnadsfasen.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Redovisning av separata analyser enligt ovan. I den integrerade modellberäkningen studeras inte denna process explicit.

**Kapseldefektscenario:** Eftersom den värmetransport som beskrivs ovan gäller tiden före vattenmättnad av bufferten behöver inga extra beräkningar göras för detta scenario.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

## **3.5 Hydrauliska processer**

Vatten- och gasomsättning i kapselns inre beskrivs i kapitlet som behandlar processer i bränsle/kapselns hålrum. Därför beskrivs inga hydrauliska processer här.

## **3.6 Mekaniska processer**

### **3.6.1 Inledning**

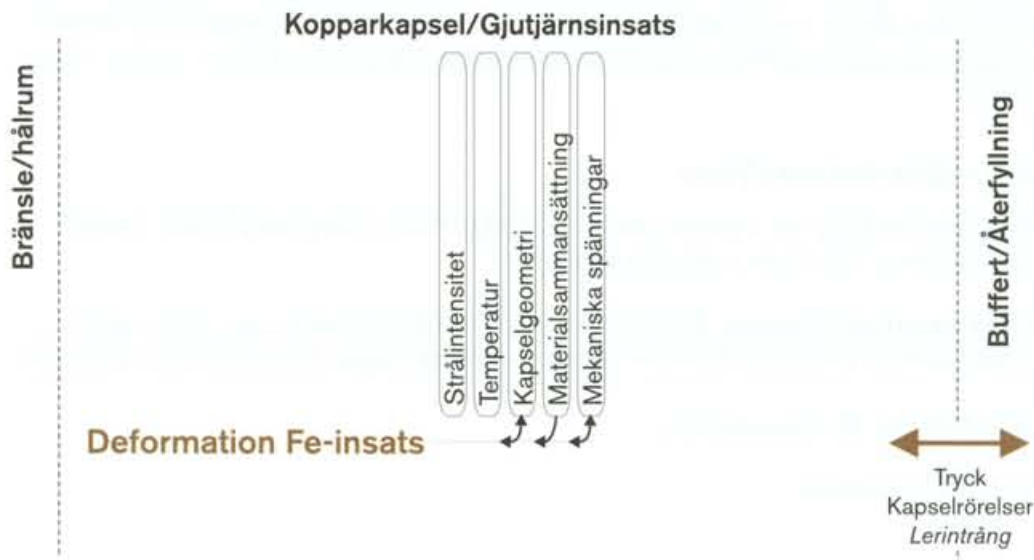
Fasta material som utsätts för mekaniska belastningar kan bete sig på olika sätt. Ett *elastiskt* material deformeras vid belastningen för att återta sin ursprungliga form då lasten avlägsnas. Deformationen, till exempel en töjning, är proportionell mot den pålagda spänningen (kraften per ytenhet).

Utanför det elastiska området får materialet en bestående formförändring, en *plastisk* deformation, när de yttre krafterna avlägsnas. Den spänning vid vilken en påtaglig plastisk töjning sker kallas för materialets *sträckgräns*.

Strukturförändringar som orsakas av deformationen, ger en härdning av materialet (bearbetningshärdning) och därför måste successivt högre spänningar användas för att ytterligare töja materialet. Dessa förändringar leder så småningom till *brott*. Om töjningen vid brott är stor jämfört med den elastiska töjningen sägs materialet vara *duktilt*. Annars betraktas materialet som *sprött*. Brottöjningen används som ett mått på duktiliteten.

*Krypning* är en kontinuerlig deformation med tiden. Som en tumregel gäller att metaller börjar krypa vid temperaturer mellan  $0,3T_M$  och  $0,4T_M$  där  $T_M$  är metallens smältemperatur i Kelvin.

### 3.6.2 Deformation gjutjärnsinsats



Figur 3-5. Deformation gjutjärnsinsats.

#### Överblick

Då kapseln belastas mekaniskt, t ex då bufferten sväller, kommer spänningar att byggas upp i kapselmaterialet som deformeras till en början elastiskt och, om spänningarna är stora, även plastiskt. Deformationens storlek vid en given belastning beror av gjutjärnsinsatsens hållfasthet som bestäms av dess materialegenskaper och geometri. Vid extrema belastningar kommer gjutjärnsinsatsen att kollapsa.

Gjutjärnsinsatsen är den viktigaste mekaniska barriären i förvaret. Om den kollapsar äventyras en rad säkerhetsfunktioner. Processen är därmed av central betydelse för förvarets funktion.

#### Allmän beskrivning

Under normala förhållanden i djupförvaret kommer gjutjärnsinsatsen att utsättas för en yttre last på 14 MPa sammansatt av ett högsta svälltryck från bentoniten på 7 MPa och ett högsta vattentryck på 7 MPa. Trycket kan betraktas som isostatiskt dvs lika stort över hela ytan. Under en istid kan kapseln få en ökad last. Ett istäcke på cirka 3000 m som flyter på grundvattnet ger en ökning med 27,5 MPa. Även i detta fall kan trycket betraktas som isostatiskt. Dessa belastningar ger i första hand upphov till tryckspänningar i kapseln.

I samband med att bentoniten vattenmättas kan ojämna trycksituationer uppstå. Dessa kan ha samband med ojämn vatteninträning eller ovala eller svagt böjda deponeringshål. I vissa fall kan man inte utesluta att en ojämn belastning kan kvarstå under lång tid. Sådana belastningar kommer att utöver tryckspänningarna också att ge upphov till böjspänningar (dragspänningar).

Avvikelse från normallastfallet kan också uppkomma genom flacka bergförskjutningar över deponeringshålet. Resultaten blir böjspänningar och dragspänningar i kapselinsatsen. Extremt stora förskjutningar (åtskilliga decimeter) leder till kapselbrott.

En mekanisk last uppkommer också genom inre tryckuppbyggnad på grund av inre gasbildning genom alfasönderfall. Det stora tomtrummet i kapseln gör att effekterna av gasuppbyggnad kommer att vara försumbar för alla rimliga tidsperioder.

Om kopparkapseln är skadad så att vatten kommer i kontakt med kapselinsatsen leder detta till korrosion, se avsnitt 3.7.1. Korrosionshastigheten är låg, men leder till en successiv nedsättning av insatsens mekaniska hållfasthet. I ett långt perspektiv kommer detta att leda till brott. När och hur detta sker beror på skadans omfattning, på korrosionsangreppets form och på lastsituationen för den aktuella kapseln.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Kapselns beteende för isostatisk last har modellerats. Resultaten visar att insatsen får sitt största bidrag till stabiliteten från de mellanväggar som skiljer kanalerna för bränslelementen.

Vid ett enaxligt dragprov kommer materialet att ta maximal last vid 16 procent logaritmisk töjning. Brotttöjningen är 22 procent linjär töjning, vilket är 20 procent logaritmisk töjning. Inget väsentligt kommer att ske med kapselns beteende förrän kapselns "ekrar" plasticeras. Detta sker efter att 16 procent töjning uppnås i någon del av kapseln. En töjning på 16 procent har därför valts som kollapskriterium för att ge en pessimistisk bedömning av kapselns motståndskraft mot yttre tryck.

Det kritiska övertrycket för PWR och BWR varianterna av kapselinsatsen har då beräknats till 114 MPa respektive 81 MPa /Ekberg, 1995/. Detta ska jämföras med den största lasten på 41,5 MPa, som kapseln förutsätts utsättas för i förvaret i samband med en istid.

Ojämnhet i tryckuppbyggnaden i bentoniten kan inträffa både under och efter vattenmättnaden. För vattenmättnadsfasen har tre lastfall kontrollberäknats efter handbok /Werme, 1998/.

- 1) Kapseln är fast inspänd i ändytorna och i en tiondedel av längden längs mantelytan närmast ändytorna. En jämnt utbredd horisontell last motsvarande fullt utbildat bentonitsvälltryck verkar längs den resterande kapselytans ena sida.
- 2) Kapseln är fritt upplagd längs en tiondedel av längden längs mantelytan närmast ändarna. En jämnt utbredd horisontell last motsvarande fullt utbildat bentonitsvälltryck verkar längs den resterande kapselytans ena sida.
- 3) Kapseln är fast inspänd i ena ändytan och en femtedel av längden längs mantelytan närmast denna ändyta. En jämnt utbredd horisontell last motsvarande fullt utbildat bentonitsvälltryck verkar längs den resterande kapselytans ena sida.

Om kapseln är snedplacerad eller lutande i deponeringshålet eller om berget är ojämnt kan en bestående tryckojämnhet uppstå i bentoniten även efter vattenmättnad med fullt vattentryck och islast. Därför har även följande två fall beräknats /Werme, 1998/:

- 4a) Svälltrycket är fullt utbildat på ena sidan av kapselns mantelyta och ändytorna. På andra sidan av mantelytan råder 20 procent förhöjt svälltryck längs den centrala halvan och 20 procent sänkt svälltryck längs den resterande fjärdedelarna vid kapseln ändar.
- 4b) Motsvarande lastfall, men där svälltrycken är 50 procent högre respektive lägre ska betraktas som ett extremfall för vilken inga extra säkerhetsmarginaler krävs.

Resultaten av de enkla handboksberäkningarna var att sträckgränsen för gjutjärnsinsatsen (240 MPa) inte nås i fallen 1, 2, 4a eller 4b medan fall 3 leder till kollaps av kapselinsatsen. För fallen 2 och 3 har därför FEM-beräkningar genomförts, där man även tagit hänsyn till bentonitens materialegenskaper för att ge en mer realistisk belastning på kapseln /Börgesson och Hernelind, 1998/. Största dragspänningarna i kapselinsatsen visade sig då ligga under 55 MPa, vilket således är under sträckgränsen för gjutjärnsinsatsen.

**Korroderande kapselinsats:** Följderna av en skada på kopparkapseln och, som ett resultat av detta, en korroderande kapselinsats har utretts av Bond et al /1997/. I det analyserade fallet har korrosionshastigheten för insatsen satts till 0,1 µm per år och den ursprungliga skadan på kopparhöljet så liten att korrosionen till en början sker på ett begränsat område kring skadan. Efter mer än 200 000 år kommer en övergång till korrosion över hela insatsytan efter att kopparhöljet givit vika för trycket från korrosionsprodukterna. Fram till den tidpunkten kommer kapselinsatsens mekaniska hållfasthet inte att bli nämnvärt nedsatt. För längre tider har inga analyser genomförts.

**Jordskalv:** För en självbärande stålkapsel med diametern 0,59 m på gjutjärnsinsatsen har Börgesson /1992/ genomfört beräkningar för bergrörelser på 0,1 m. Kapselinsatsen hade ett beräknat kollapstryck på 60 MPa, dvs något mindre än för gjutjärnsinsatsen. Resultaten visade att skjuvrörelsen inte ledde till brott på kapseln. Gjutjärnsinsatsen i nuvarande utformning bedöms ha åtminstone lika goda egenskaper i detta avseende.

### **Tidsperspektiv**

Tryckuppbyggnaden till 14 MPa beräknas ta från några år till några decennier i anspråk. Tidsperspektiven för klimatstyrda förändringar bestäms av förutsättningarna för klimatscenariot.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Beräkningarna är genomförda för en kapselinsats i homogent segjärn och måste anses som tillförlitliga för de beräknade situationerna. De huvudsakliga osäkerheterna vad gäller kapselns hållfasthet kommer från möjliga avvikelser från ideala förhållanden, icke upptäckta gjutfel eller avvikelser från de eftersträvade materialegenskaperna för segjärnet.

Ekbergs /1995/ beräkningar visar att betydande gjutfel kan få förekomma utan att kapselns hållfasthet försämras så att den kritiska lasten blir lägre än 45 MPa. Övriga variationer och faktiskt utfall från tillverkningen kan bestämmas först då provserier av kapselinsatser utvärderats.

**Korroderande kapsel:** För korrosionsfallet finns osäkerheter vad gäller korrosionsprodukternas mekaniska egenskaper. Det finns även osäkerheter beträffande kapselinsatsens beteende vid pålastningen orsakad av de växande korrosionsprodukterna efter att korrosionen övergått från ett lokalt angrepp till korrosion över hela insatsens yta. En experimentell studie av korrosionsprodukterna och av de krafter tillväxten av korrosionsprodukterna kommer att utöva på kopparkapseln och kapselinsatsen pågår.

**Jordskalv:** Även om kapselinsatsen kommer att hålla för den postulerade skjuvrörelsen i berget finns det kvarstående osäkerheter kring beteendet över långa tider om kopparhöljet deformerats som ett resultat av skjuvrörelsen.

### Hantering i säkerhetsanalysen

**Basscenario:** Beräkningsfallen ovan diskuteras i redovisningen av förvarets mekaniska utveckling.

**Kapseldefektsscenario:** Resultaten från Bond et al /1997/ diskuteras i redovisningen av en skadad kapsels mekaniska utveckling och används som underlag för modelleringar av kapselskador vid radionuklidtransportberäkningar.

**Klimatförändringar:** Beräkningsfallen som rör glaciation ovan diskuteras i redovisningen av förvarets mekaniska utveckling. En **initialt skadad** kapsels beteende under istid beror på den ursprungliga skadans omfattning och antaganden om korrosionsangreppen.

För en mindre initial skada, som endast leder till lokala korrosionsangrepp i området kring skadan kommer kapseln hållfasthet att förbli tillräcklig för att motstå en islast /Bond et al, 1997/.

**Jordskalv:** I SR 97 ansätts pessimistiskt att bergrörelser som leder till större förskjutningar än 10 cm i ett deponeringshål leder till kapselskador. Sannolikheten för och konsekvenser av detta behandlas i jordskalvsscenarioet.

### 3.6.3 Deformation av kopparkapsel från yttre övertryck



Figur 3-6. Deformation av kopparkapsel från yttre övertryck.

#### Överblick, allmän beskrivning

Kopparkapselns uppgift är att vara korrosionsbarriär. Kopparkapselns mekaniska hållfasthet är av underordnad betydelse, men kapseln måste tåla lasterna i samband med hantering, transport och deponering. Kopparmaterialet ska också ha tillräcklig duktilitet för att tillåta de töjningar i materialet som uppkommer då kapseln av den yttre lasten deformeras mot insatsen, antingen plastiskt eller genom kryp.



För säkerhetsanalysen behöver två konsekvenser av denna process utredas: Dels den mekaniska påfrestningen på kopparkapseln, dels förändringar i storlek hos gapet mellan kopparkapsel och gjutjärnsinsats. Det senare har betydelse för händelseförloppet om vatten skulle tränga in i kapseln.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Beräkningar av spänningar och töjningar i kopparkapseln efter att fullt tryck (14 MPa) byggs upp i förvaret har gjorts av Cakmak /1994/ och Börgesson /1992/.

Cakmak /1994/ förutsatte en snabb tryckuppyggnad där fullt hydrostatiskt tryck var utbildat inom en timme. Slutsatserna av beräkningarna var att:

- Kopparmanteln genomplasticeras och kontakt uppstår mellan insatsen och kopparmanteln till följd av det yttre trycket. Locket plasticeras delvis.
- Den maximala töjningen, som är på några procent, inträffar lokalt på insidan av manteln i närheten av övergången till locket och orsakas av plastisk deformation. Töjningen på grund av krypning i koppar är försumbar.
- Dragpåkänningen i axiell led och tangentiellt ligger runt sträckgränsen och inträffar på bland annat utsidan av manteln mitt för inre hörnet i övergången mantel/lock och i centrum av locket.

Handboksberäkningar har också genomförts för två fall där svälltrycket är fullt utbildat kring nedre halvan av kapseln medan svälltrycket är 20 procent respektive 50 procent lägre kring övre halvan. Den resulterande uppåtriktade kraften, som uppkommer av skillnaderna i tryck mot kapseln ändytor, balanseras av en skjuvkraft längs kopparkapselns nedre halva. Beräkningar visar att dessa lastfall ger upphov till axiella spänningar i koppargodset motsvarande 8,4 respektive 21 MPa /Werme, 1998/. Detta är låga spänningar jämfört med sträckgränsen på 45 MPa för kopparmaterialet.

### **Tidsperspektiv**

Kopparkapseln kommer att deformeras in mot och ta stöd från gjutjärnsinsatsen. Tidsskalan bestäms av tidsskalan för vattenupptaget i bufferten och tiden för att utveckla fullt svälltryck och fullt vattentryck. I realiteten är denna tid betydligt längre än vad som antagits i Cakmaks beräkning och tryckuppyggnaden sker troligen under loppet av år.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

De huvudsakliga osäkerheterna gäller pålastningen av kapseln från den svällande bufferten. Vid en mycket snabb pålastning (veckor till månader) kommer kopparkapseln att deformeras i första hand plastiskt. Annars kan även krypdeformationen få betydelse, men är svår att kvantifiera. Det finns dessutom fortfarande osäkerheter kring extrapoleringen och modelleringen av krypdeformationen av kopparkapseln. Vid full utbildat svälltryck förväntas gapet mellan kapsel och insats ha slutits utom i områden nära botten och lock.

Kopparkapselns krypegenskaper har också betydelse för deformationen av kapseln som ett resultat av uppbyggnaden av korrosionsprodukter i gapet. Detta hanteras i avsnitt 3.6.5.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

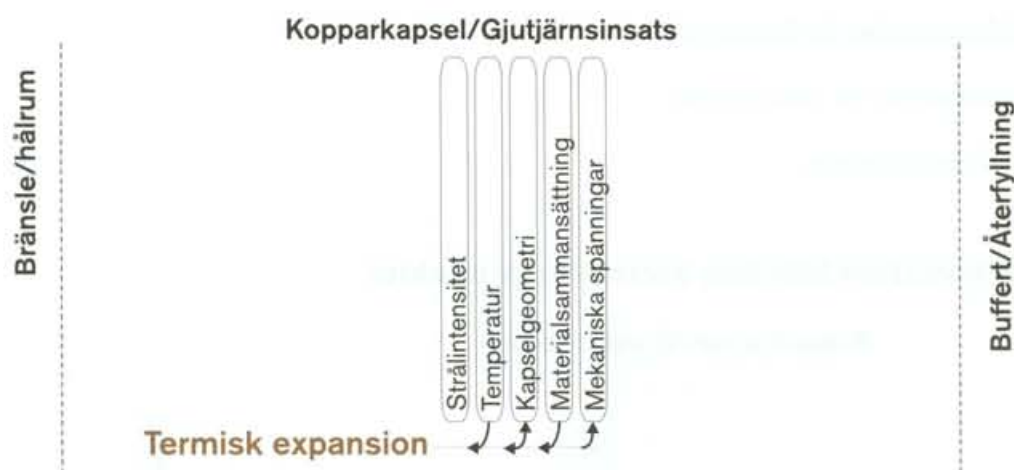
**Basscenario:** Kopparkapseln deformeras enligt Cakmak. De kvarvarande spalterna mellan kapsel och insats vid kapselns botten och lock (2 mm över en sträcka på cirka 20 cm) förväntas bli bestående. Längs mantelytan förväntas kontakt uppstå mellan insats och hölje.

**Kapseldefektscenario:** I kapseldefektscenariot har spaltens storlek avgörande betydelse för utvecklingen. Spaltstorleken väljs till 1 mm längs hela mantelytan.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

### **3.6.4 Termisk expansion (såväl gjutjärnsinsats som kopparkapsel)**



Figur 3-7. Termisk expansion.

### **Överblick, allmän beskrivning, modellstudier/experimentella studier**

Gapet mellan gjutjärnsinsats och kopparhölje kan utvidgas/slutas genom termisk utvidgning/sammandragning. Om gapet är slutet ger ytterligare kylning dragspänningar i kopparhöljet.

I nuvarande utformning är storleken på gapet mellan gjutjärnsinsats och kopparkapsel 2 mm. Vid de högsta temperaturerna som beräknas uppkomma i kapseln och insatsen kommer längdutvidgningen orsakad av temperaturskillnaden mellan dessa båda komponenter att kunna ge upphov till töjningar i kopparhöljet på 0,1 %. Även om töjningarna kan bli något större lokalt är detta försumbart ur hållfasthetssynpunkt. Det är dessutom osannolikt att de största temperaturskillnaderna kommer att kunna kvarstå när insatsen får kontakt med kopparhöljet.



### Tidsperspektiv

Uppvärmningen till den högsta temperaturen sker mycket snabbt efter deponering. Avsvlnandet till omgivningstemperaturen tar hundratals till tusentals år i anspråk.

### Naturliga analogier

Inte relevant.

### Sammanfattning av osäkerheter

De osäkerheter som finns gäller värmeöverföringen mellan bränsle, insats och kopparkapsel samt de temperaturskillnader man får mellan de olika komponenterna innan fortfarighet uppnåtts. Storleken och betydelsen av dessa temperaturskillnader måste bestämmas experimentellt. Vid stora temperaturskillnader kan axiella dragspänningar uppstå i kopparhöljet.

### Hantering i säkerhetsanalysen

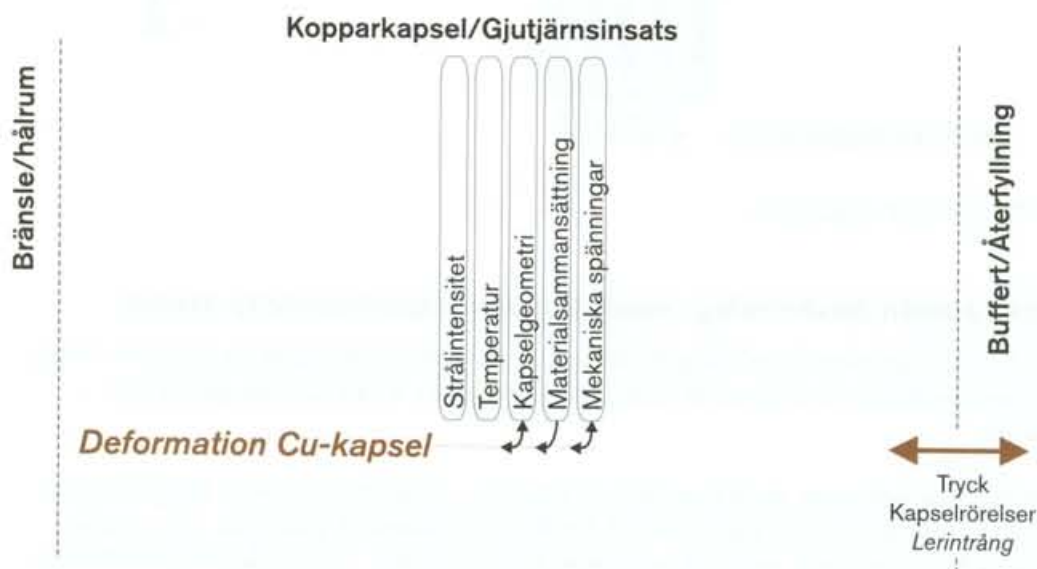
**Basscenario:** Processen diskuteras kort vid beskrivningen av förvarets mekaniska utveckling.

**Kapseldefektsscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

## 3.6.5 Deformation från inre korrosionsprodukter



**Figur 3-8.** Deformation från inre korrosionsprodukter. Processen är endast relevant då kopparkapseln är skadad.

## **Överblick**

Om kopparkapseln skulle bli otät kommer vatten eller vattenånga att kunna tränga in i gapet mellan kapselinsatsen och kopparhöljet och ge upphov till anaerob korrosion av insatsen, se avsnitt 3.7.1. Om vattnet även kan tränga innanför insatsens lock ger det upphov till anaerob korrosion också på insidan av kanalerna för bränsleelementen.

Detta leder i båda fallen till en uppbyggnad av korrosionsprodukter, som i sin tur ger mekaniska spänningar i kapseln.

## **Allmän beskrivning**

Händelseförloppet för denna process förväntas i stora drag bli följande:

Vatten rinner in i gapet mellan kapselinsatsen och kopparhöljet och in i kapselinsatsen med anaerob korrosion som följd. Detta leder till vätgasutveckling som ökar trycket inne i kapseln varpå inflödet av vatten minskar. Efter en tid kommer intransport av vatten eller vattenånga genom diffusion att vara större än inläckaget av vatten på grund av tryckskillnaden. Tiden fram till dess varierar med storleken på skadan i kopparkapseln samt med korrosionshastigheten, och är för rimliga fall tusentals år. Indiffusionen av vattenånga innebär att korrosionen inte kommer att avstanna helt. Förloppet leder till en långsam uppbyggnad av korrosionsprodukter. Produkterna upptar en större volym än motsvarande mängd gjutjärn och med tiden byggs inifrån ett mekaniskt tryck upp mot kopparkapseln. Detta leder till att kopparkapseln deformeras lokalt och eventuellt slutligen brister.

## **Modellstudier/experimentella studier, tidsperspektiv**

Olika utvecklingar av en tidig kapselskada med åtföljande korrosion av kapselinsatsen har modellerats av Bond et al /1997/.

Oavsett kapselskadans storlek och korrosionshastigheten förväntas efter en tid ett tillräckligt stort vätgasstryck att ha byggts upp för att hindra vatten i vätskeform att tränga in i kapseln. Därefter kommer korrosionen ändå att kunna fortsätta genom att vattenånga kan diffundera in i kapseln.

Bond et al /1997/ utvecklade en modell för denna diffusionsbegränsade korrosion. Syftet var att förutsäga hur de fasta korrosionsprodukterna byggdes upp i gapet mellan insats och kopparkapsel. Modellen tog hänsyn till förändringen i storleken på gapet medan korrosionen pågår, möjlig förändring i korrosionshastigheten och flödet ut ur kapseln av vätgasen som produceras genom korrosionen.

Gapet förväntas så småningom fyllas med magnetit,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , och beräkningarna användes för att analysera konsekvenserna av detta på kapselns hållfasthet. Två situationer analyserades: ett extremfall där hela ytterarean på insatsen korroderade och ett fall där korrosionen var begränsad till ett område kring den ursprungliga defekten. Det senare fallet övergår i det förra efter att kopparmaterialet kring den ursprungliga defekten börjat ge efter. Detta beräknas i modellen ta cirka 20 000 år. Från det att den första skadan uppstått tar det enligt beräkningarna minst 100 000 år innan mer omfattande skador uppstår på kopparkapseln.

## **Naturliga analogier**

Inte relevant.

## Sammanfattning av osäkerheter

Modelleringen vilar på antaganden om korrosionsprodukternas egenskaper. Dessa är inte verifierade experimentellt. Det finns även osäkerheter kring kapselinsatsens beteende vid pålastningen orsakad av de växande korrosionsprodukterna efter att korrosionen övergått från ett lokalt angrepp till korrosion över hela insatsens yta. En experimentell studie av korrosionsprodukterna och av de krafter tillväxten av korrosionsprodukterna kommer att utöva på kopparkapseln och kapselinsatsen pågår.

## Hantering i säkerhetsanalysen

**Basscenario:** Inte relevant.

**Kapseldefektscenariot:** Ovan redovisade beräkningsfall diskuteras i redovisningen av förvarets mekaniska utveckling. För att hantera osäkerheterna i säkerhetsanalysen belyses processen med ett pessimistiskt valt fall.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Förändringar i sammansättning hos grundvattnet kan behöva diskuteras. Annars: Se basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Förändringar av inflödet av vatten till kapseln kan behöva diskuteras om bufferten skadas. Annars: Se basscenariot.

## 3.7 Kemiska processer

### 3.7.1 Korrosion gjutjärnsinsats



Figur 3-9. Korrosion gjutjärnsinsats.

## Överblick, allmän beskrivning

Vatten i kapselns hålrum kan korrodera gjutjärnsinsatsen. Till följd av processen kan gjutjärnsinsatsen integritet och mekaniska hållfasthet äventyras. Ett annat resultat är bildning av vätgas och fasta korrosionsprodukter som kan utöva tryck mot koppar-kapseln.

Processen är central för kapselns hydrauliska, mekaniska och kemiska utveckling om kopparhöljet skulle skadas.

**Korrosion orsakad av vatten inuti intakt kapsel:** Det kan inte helt uteslutas att en viss mängd vatten förs över i kapseln inneslutet i bränslepinnar. Efter att syret inne i insatsen förbrukats genom korrosion kommer detta vatten att ge upphov till anaerob korrosion på insatsens insidor.

**Korrosion orsakad av vatten som trängt in i defekt kapsel:** Grundvatten på förvarsdjup är syrefritt. Gjutjärnsinsatsen kommer därför att korrodera anaerobt under vätgasutveckling och bildning av magnetit. Den bildade magnetiten förväntas bestå av ett tunt vidhäftande skikt och ett yttre lösare skikt med dålig vidhäftning. Det inre skiktets transportmotstånd kommer att bestämma korrosionshastigheten, som därför förväntas vara konstant över långa tider, se nedan.

Omfattningen av korrosionen kommer att styras av mängden tillgängligt vatten. Korrosionshastigheten för järn under syrefria förhållanden beror av vattensammansättningen och temperaturen. Korrosionsprodukterna och korrosionsprocessen påverkar de kemiska förhållandena inne i kapseln.

## Modellstudier/experimentella studier

**Korrosion orsakad av vatten inuti intakt kapsel:** Bränsleknipporna kommer att torkas innan de förs över i kapseln, men en viss mängd vatten kan trots detta överföras. Ett mycket pessimistiskt antagande skulle vara att en bränslepinne med maximal vattenfyllnad överförs till varje kapsel.

Omfattningen av den korrosion detta skulle kunna orsaka kan modelleras med ett enkelt massbalansresonemang:

Den totala mängden vatten som kan rymmas i tomtrycket i en bränslepinne är 50 g. Om detta vatten reagerar uteslutande med järnet i kapseln och pessimistiskt antas bilda FeO skulle maximalt drygt 150 g järn korrodera bort. Detta motsvarar ett korrosionsdjup på mindre än 1 µm för den gjutna insatsen. Korrosionen förutsätts äga rum då temperaturen i kapseln är tillräckligt hög för att vatten ska vara i gasfas. Eventuell gropfrätning, dvs lokala, djupa korrosionsangrepp, kan därför uteslutas.

**Korrosion orsakad av vatten som trängt in i defekt kapsel:** Anaerob korrosion av gjutjärn har studeras experimentellt av Smart et al /1997/, som funnit att korrosionshastigheten är mycket låg och väl under 1 µm/år efter några tusen timmar även i det aggressivaste vattnet som provats (Äspö grundvatten KAS-03), se tabell 3-2.

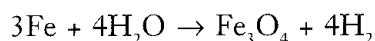
**Tabell 3-2. Sammansättningen (ppm) på syntetiskt Äspö grundvatten KAS-03.**

Na <sup>+</sup>	K <sup>+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	Cl <sup>-</sup>	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	pH
3000	7	4400	50	12 000	11	710	7-8

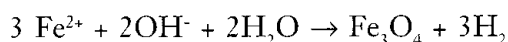
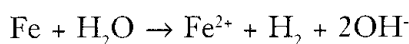
Vid reaktionen mellan gjutjärn och vatten produceras magnetit och vätgas. Vätgasproduktionen vid den högsta mätta korrosionshastigheten motsvarar  $2 \text{ dm}^3/(\text{m}^2 \cdot \text{år})$ . Den totala inre arean i kapselinsatsen är cirka  $33 \text{ m}^2$  och årsproduktionen av vätgas skulle alltså vara  $66 \text{ dm}^3$  vid normalt tryck, eller mindre än  $1,3 \text{ dm}^3$  vid trycket på förvaringsnivå (500 m).

Korrosionshastigheten har visat sig vara oberoende både av vätgastrycket och halten  $\text{Fe}^{2+}$  i systemet. Detta tyder på att korrosionshastigheten med största sannolikhet bestäms av transportegenskaperna i magnetitskiktet på järnnytan:

Den bildade magnetiten består dels av ett tunt starkt vidhäftande skikt och ett yttre lösare skikt med dålig vidhäftning /Blackwood et al, 1994/. Blackwood et al /1994/ förklarar bildandet av dessa två skikt med att det vidhäftande skiktet bildas direkt på metallytan genom reaktionen:



medan det lösare skiktet troligen bildats genom en fällningsprocess:



Genom att magnetiten bildar dessa två skikt, där det vidhäftande skiktet bildas mycket snabbt och därefter inte ytterligare ökar i tjocklek, förväntas korrosionshastigheten vara konstant över långa tider.

Den korroderande järninsatsen kommer att påverka vattenkemin i tomrummet i kapseln genom att tillföra höga halter av löst vätgas och små halter av löst Fe(II). Beräkningar med EQ3/6 visar att lösligheten för Fe(II) i tomrummet i kapseln som förväntat beror av redoxförhållandena, men knappast kan vara högre än  $10^{-7} \text{ mol/dm}^3$ . Vätgasen kommer att vara löst med en halt motsvarande ett vätgastryck på högst 14 MPa. Järnhalterna är för låga för att ha någon avgörande betydelse för vattenkemin. Vätgasen kan betraktas som inert och som nämntes ovan har den ingen påverkan på korrosionsförloppet.

### **Tidsperspektiv**

Med en korrosionshastighet på  $1 \mu\text{m}/\text{år}$  kommer metalliskt järn att finnas närvarande i tiotusentals år. Tiden då metalliskt järn finns närvarande är omvänt proportionell mot korrosionshastigheten.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

**Korrosion orsakad av vatten inuti intakt kapsel:** Det finns stora osäkerheter kring mängden vatten, som kan tänkas föras in i en kapsel av misstag. I den överväldigande mängden kapslar finns troligen inget vatten. Osäkerheterna saknar här betydelse eftersom den korrosion vattnet i värsta fall skulle kunna ge upphov till är försumbar.



**Korrosion orsakad av vatten som trängt in i defekt kapsel:** Osäkerheterna vad avser korrosionshastigheten är små och förväntad korrosionshastighet kan förutsättas ligga under 1 µm/år med 0,1µm/år som ett troligt värde. De experimentella undersökningarna visar att om det skyddande magnetitskiktet skadas återbildas det mycket snabbt och de mätta korrosionshastigheterna kan förutsättas gälla även för långa tidsperioder.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Även med ett pessimistiskt antagande om 50 g vatten per kapsel kan effekterna av processen försummas.

**Kapseldefektscenario:** Materialet ovan används i en integrerad beskrivning av utvecklingen av en defekt kapsel.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Förändringar i grundvattnets sammansättning kan eventuellt behöva diskuteras. Annars: Se basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

## **3.7.2 Galvanisk korrosion**



*Figur 3-10. Galvanisk korrosion. Processen är endast relevant då kopparkapseln är skadad.*

### **Överblick, allmän beskrivning**

Om kopparhöljet skulle skadas och grundvatten kommer i kontakt med gjutjärnsinsatsen kommer elektrokemiska reaktioner på kopparytan att påverka korrosionen av insatsen. Följderna av galvanisk korrosion har utretts av Blackwood och Naish /1994/.

Om grundvattnet är syrehaltigt, kan resultatet komma att bli en upp till tre gånger högre korrosionshastighet på stålet än utan den galvaniska kopplingen. Tillförseln av syre genom bufferten bedöms vara tillräckligt att den låg för att göra den galvaniska effekten obetydlig.

Om vattnet är syrefritt kommer den galvaniska kopplingen inte att kunna öka korrosionshastigheten med mer än vad som motsvaras av den ökade arean för reduktion av vatten som kopparkapseln bidrar med. Det motsvarar en möjlig fördubbling av korrosionshastigheten. Efter att en magnetitfilm bildats på järninsatsen kommer den galvaniska kopplingen till kopparkapseln att vara betydelselös eftersom transporten genom magnetitskiktet bestämmer korrosionshastigheten.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Se ovan.

### **Tidsperspektiv**

Sker efter kapselgenombrott.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Det är inte troligt att syrehaltigt vatten kommer att tränga in i kapseln.

I syrefritt vatten kommer effekterna att vara små och osäkerheterna kring det exakta bidraget från galvanisk korrosion bedöms som försumbara jämfört med osäkerheterna i bedömningar av korrosionshastigheten. En försiktig ansats för korrosionshastigheten för anaerob korrosion av kapselinsatsen kommer att täcka eventuella bidrag från galvanisk korrosion.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Inre relevant.

**Kapseldefektscenario:** Inverkan av galvanisk korrosion ligger inom felgränserna för järnets korrosionshastighet och behandlas därför inte förutsatt att inträngande vatten är syrefritt. Om syre eventuellt finns närvarande initialt bestäms omfattningen av korrosionen av mängden tillgänglig syre.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Förändringar i grundvattnets sammansättning kan behöva diskuteras. Annars: Se basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador: Se kapseldefektscenariot. Annars: Se basscenariot.

### 3.7.3 Spänningskorrosion gjutjärnsinsats



Figur 3-11. Spänningskorrosion gjutjärnsinsats.

#### Överblick

Spänningskorrosion på metaller kan uppkomma vid en kombination av statiska dragspänningar, speciell kemisk miljö och, i vissa fall, speciella metallurgiska förhållanden. Ogynnsamma kombinationer av dessa förhållanden kan leda till att sprickor bildas och utbredd. Utbredningshastigheten kan variera över ett brett område från  $10^{-9}$  mm/s till  $10^{-1}$  mm/s.

I en kapsel med intakt kopparhölje kan salpetersyra från radiolys av restmängder av luft tänkas orsaka spänningskorrosion i områden med dragspänningar i gjutjärnsinsatsen /Blackwood et al, 1995/.

#### Allmän beskrivning, modellstudier/experimentella studier

Under det tidiga skedet efter förslutning och deponering kommer temperaturen på insatsen närmast bränslet att vara över  $150^{\circ}\text{C}$ . Vid den temperaturen finns inget vatten i vätskeform i kapseln och den relativa luftfuktigheten är för låg för att en vattenfilm ska kunna bildas på metallytan, även om vatten skulle ha förts över till kapseln innestängt i en bränslestav. (Den största mängd som i enstaka fall skulle kunna föras över på detta sätt bedöms vara 50 g, motsvarande tomvolymen i en bränslestav.) För att en vattenfilm ska bildas krävs en relativ fuktighet på ungefär 40 procent. Under dessa förhållanden är salpetersyra inte stabil utan sönderfaller till  $\text{NO}_2$ , som är den dominerande radiolysprodukten i torr luft /Reed och van Konynenburg, 1991a, b/. För att vattnet och syret i kapseln inte ska hinna förbrukas under den tid det tar för temperaturen att sjunka så att vatten/salpetersyra kan kondenseras måste korrosionshastigheten vara extremt låg.

För att spänningskorrosion ska uppstå krävs utöver en korrosiv miljö också dragspänningar i materialet. I djupförvaret står kapselinsatsen under yttre övertryck och dragspänningar uppträder på den gjutna insatsen endast lokalt och i små områden enligt beräkningar /Ekberg, 1995/. Det är därför mycket osannolikt att spänningskorrosion skulle leda till genomgående sprickor i kapseln och framförallt att det skulle leda till att kapselns integritet äventyras.



### Tidsperspektiv

En jämvikthalt av salpetersyra beräknas ha nåtts efter några decennier efter förslutning av kapseln. Motsvarande tidsskala bedöms gälla för riskerna för spänningskorrosion.

### Naturliga analogier

Inte relevant.

### Sammanfattning av osäkerheter

Riskerna för spänningskorrosion bedöms som små eftersom endast lokala områden i insatsen har dragspänningar. Den största osäkerheten gäller mängden vatten som kan ha förts in i kapseln.

### Hantering i säkerhetsanalysen

**Basscenario:** Eventuell spänningskorrosion bedöms sakna betydelse för kapselns livslängd.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

## 3.7.4 Strålpåverkan



Figur 3-12. Strålpåverkan.

### Överblick, allmän beskrivning, modellstudier/experimentella studier

Neutronstrålning från bränslet kan ge upphov till mindre materialförändringar i gjutjärnsinsats och kopparkapsel.

Effekterna av bestrålning av kapselmaterialet under lång tid har diskuterats av Werme /1997/. Det använda bränslet kommer under lång tid att sända ut  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ - och neutronstrålning. Av dessa är det endast neutronstrålningen som kan tänkas påverka kapselmaterialets mekaniska egenskaper. Effekterna av neutronbestrålning på fasta material är kända sedan länge /se t ex Billington och Crawford, 1961; Porter, 1960/.

Neutronbestrålning förändrar materialets mekaniska egenskaper så att hållfastheten ökar medan duktiliteten sjunker. En ökning av hållfastheten har ingen betydelse för kapseln, men nedsatt duktilitet skulle kunna förkorta kapselns livstid i förvaret. En känslig indikator för materialförändringar är förhöjning av sträckgränsen vid dragprovning. För järn och koppar är förändringarna av de mekaniska egenskaperna liten för en neutronfluens på mindre än  $10^{17}$  n/cm<sup>2</sup>. För en neutronfluens på  $10^{18}$  n/cm<sup>2</sup> är höjningen i sträckgräns för stål upp till 10 procent /Porter, 1960/. Utifrån beräkningar av Håkansson /1995a,b/ kan totala (> 0,1 MeV) neutronfluensen under 100 000 år pessimistiskt uppskattas till mindre än  $5 \cdot 10^{14}$  n/cm<sup>2</sup>. Detta är flera storleksordningar lägre än vad som krävs för mätbar materialpåverkan ( $>10^{17}$  n/cm<sup>2</sup>).

Neutronbestrålningen kan också tänkas leda till att aktiveringsprodukter bildas i kapselinsatsen. De aktivitetsmängder det kan bli tal om är betydelselösa jämfört med andra aktiveringsprodukter i bränslekomponenterna. Neutronfluxet i bränslet under drift är ungefär  $10^{13}$  n/(cm<sup>2</sup>·s). Stråldosen till kapselmaterialet är alltså åtskilliga storleksordningar lägre.

### ***Tidsperspektiv***

Neutronerna kommer från spontan fission och från ( $\alpha$ , n)-reaktioner i bränslet. Båda fenomenen minskar kraftigt med tiden och 1000 år efter inkapsling har stråldosen minskat med en faktor trettio /Håkansson, 1996/.

### ***Naturliga analogier***

Inte relevant.

### ***Sammanfattning av osäkerheter***

Det råder ingen osäkerhet om att effekterna av neutronbestrålningen är betydelselösa och helt kan försummas i en bedömning av kapselns funktion i djupförvaret.

### ***Hantering i säkerhetsanalysen***

**Basscenario:** Processen försummas.

**Kapseldefektsscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

### 3.7.5 Korrosion kopparkapsel



Figur 3-13. Korrosion av kopparkapseln.

#### Överblick

Kopparkapselns utsida bedöms i ett djupförvar kunna korroderas av

- syre från förvarets öppethållande,
- syre som tillförs från bufferten eller från grundvatten via bufferten,
- salpetersyra som bildats genom  $\gamma$ -radiolys av kväveföreningar i fuktig luft i gapet mellan kapsel och buffert,
- sulfid som tillförs från bufferten eller från grundvattnet via bufferten.

Korrosionsprocesserna påverkas marginellt av de förändringar i temperaturen som förväntas i djupförvaret. Resultatet av korrosion blir korrosionsprodukter samt en förändring av kopparhöljets tjocklek, efter mycket långa tider blir konsekvensen att höljets isolering bryts.

#### Allmän beskrivning, modellstudier/experimentella studier

Kopparhöljet är kapselns korrosionbarriär. Det ska ge betryggande skydd mot korrosion i förvaret under lång tid efter vattenmättnad. Det ska också ge skydd mot atmosfärisk korrosion innan deponering och efter deponering innan vattenmättnad. Inga kända former av korrosionsangrepp ska kunna leda till att kapseln får en livslängd kortare än 100 000 år.

Efter vattenmättnad kommer syre fortfarande att finnas närvarande i kapselns omgivning. Detta syre förbrukas dels genom reaktioner med kopparkapseln, dels genom reaktioner med mineraler i bentonitbufferten. När syret förbrukats förväntas de reducerande förhållanden som rådde innan förvaret byggdes att återupprättas. Den tid detta tar har uppskattats till 10 till 300 år [Wersin et al, 1994a]. Under denna tid är också lokal korrosion som gropfrätning möjlig. Dessa typer av korrosion kan leda till lokalt betydligt djupare korrosionsangrepp än den genomsnittliga korrosionen. Omfattningen på gropfrätningen beskrivs ofta med gropfrätningfaktorn, som är kvoten mellan största frättdjup och djupet av den allmänna korrosionen.

När vattnet är reducerande är koppar immun mot korrosion. För att ytterligare korrosion ska kunna äga rum måste vattnet innehålla lösta ämnen som kan påverka immuniteten. För djupförvarsförhållanden är löst sulfid eller en kombination av mycket höga kloridhalter och lågt pH tänkbara. Eftersom djupa grundvatten är neutrala eller lätt alkaliska och bufferten motverkar försurning är lösta sulfider i praktiken de enda korrosiva ämnen som kan reagera med kopparkapseln efter att syret i förvaret förbrukats. På förvarsdjup har grundvattnen mycket låga sulfidhalter, betydligt lägre än  $5 \cdot 10^{-5}$  mol/dm<sup>3</sup>, och lösligheten för de sulfidmineraler som finns i bentoniten är högst av samma storlek. Detta innebär att korrosionen av kopparkapseln på grund av sulfider kommer att styras av tillgången och tillförseln av sulfider från grundvattnet och bufferten.

### Korrosion under syrehaltiga förhållanden

I närvaro av syre kommer koppar att oxideras till Cu<sub>2</sub>O eller CuO i rent vatten beroende på redoxpotentialen. I närvaro av ligander kan hydroxisulfater, hydroxikarbonater eller hydroxiklorider bildas. Dessa kan också bildas vid atmosfärisk korrosion.

**Korrosion innan djupförvaring:** Utvändig korrosion på kopparkapsel i avvaktan på djupförvar och under djupförvarets inledningsskede har bedömts av Mattsson /1997/. Under eventuell mellanlagring i avvaktan på deponering kommer kapslarna att utsättas för atmosfärisk korrosion. Lagringen förutsätts ske i normal stadsatmosfär och om yttemperaturen på kapslarna hålls vid 20 °C skulle den uppskattade korrosionshastigheten ligga i intervallet 0,006 till 0,027 µm per år. Om yttemperaturen på kapslarna skulle ligga på högsta tillåtna, det vill säga 90 °C, uppskattas korrosionshastigheten vara 100 gånger så stor. Uppskattningen är baserad på en antagen fördubbling av den kemiska reaktionshastigheten vid en temperaturhöjning av 10 °C. Om korrosionen sker i torr luft, kommer ett skikt av i huvudsak kopparoxid att bildas på kapselytan. Korrosionsangrepp på några mikrometer innan deponering kommer inte att påverka kapselns livslängd i förvaret.

**Korrosion orsakad av vatten vid aeroba förhållanden under buffertens mätnadsfas:** Efter deponering och innan vattenmättnad skett förväntas kapseln stå i luft med hög fuktighet vid en temperatur av 90 °C. Baserat på korrosionshastigheter vid utomhus exponering av koppar i stadsatmosfär, gör Mattsson bedömningen att korrosionshastigheten kan bli så stor som 100 till 300 µm per år om syretillförseln inte begränsas. Korrosionsangreppet förväntas bli jämnt fördelat över kopparytan. Totala korrosionsangreppet kan modelleras med massbalansresonemang. Ett korrosionsangrepp på 100 µm kräver en syremängd motsvarande 30 m<sup>3</sup> om Cu<sub>2</sub>O bildas som korrosionsprodukt. Omfattningen av korrosionsangreppet kommer att begränsas kraftigt av tillgången på syre och kommer inte att påverka kapselns livslängd i förvaret.

**Korrosion orsakad av salpetersyra under buffertens mätnadsfas:** Gammabestrålningen av fuktig luft i spalten mellan kapsel och buffert leder till att kväveoxider bildas, som genom kontakten med vatten ger salpetersyra. I Marsh /1990/ visas en enkel metod att göra en överslagsberäkning av mängden producerad salpetersyra. Hastigheten för bildandet av salpetersyra ges av:

$$\frac{d[HNO_3]}{dt} = \frac{G \cdot V \cdot \rho \cdot D_0}{A_v} \cdot e^{\frac{-0,693 \cdot t}{T}}$$

där G är G-värdet (i antal molekyler/eV), V den bestrålade luftvolymen (dm<sup>3</sup>), ρ luftens densitet (g/dm<sup>3</sup>), D<sub>0</sub> begynnelse-dosraten (eV/g·år), A<sub>v</sub> Avogadros tal, t tiden (år) och T halveringstiden (år) för strålkällan. Om man förutsätter att gammastrålkällan har en

halveringstid på 30 år får man med:  $G = 0,02$  molekyler/eV och en luftspalt på 5 cm runt kapseln ( $V = 825 \text{ dm}^3$ ) en produktionshastighet för salpetersyra på 0,002 mol/år. Detta är en liten mängd, som inte märkbart påverkar kapselns livslängd.

**Kopparkorrosion efter vattenmättnad; syrekorrosion:** Kopparkorrosionen under de förväntade förhållandena i djupförvaret efter vattenmättnad är väl studerad /Korrosionsinstitutet, 1978, 1983; Werme et al, 1992; Wersin et al, 1994b/. Under en kortare period på upp till högst några hundra år efter deponering i djupförvaret då syre kommer att vara närvarande uppskattas maximala frättdjupet pessimistiskt till cirka 2 mm, men kommer troligen att vara endast några mikrometer /Wersin et al, 1994b/. Totala korrosionsangreppet kommer att bestämmas av mängden tillgängligt syre. Det bör observeras att det är den inestängda mängden syre som orsakar korrosionen både före och efter vattenmättnad. De maximala korrosionsangreppen för dessa båda fall ska alltså inte adderas.

### **Korrosion under syrefria förhållanden**

**Kopparkorrosion efter vattenmättnad:** I frånvaro av syre är koppar immun mot korrosion i rent vatten. Korrosion under vätgasutveckling kan äga rum om vattnet innehåller lösta sulfider. Korrosionsprodukterna blir då  $\text{Cu}_2\text{S}$  eller  $\text{CuS}$ . Höga kloridhalter i kombination med låga pH-värden kan också orsaka korrosion på koppar. I det förra fallet kommer korrosionshastigheten att styras av intransporten av sulfidjoner och i det senare fallet /Taxén, 1990/ av uttransporten av kopparkloridkomplex.

Efter att syret förbrukats och reducerande förhållanden återinträtt kommer kopparkorrosionen under djupförvarsförhållanden att styras av tillgången på lösta sulfider. På samma sätt som för oxiderande förhållanden har Wersin et al /1994b/ uppskattat omfattningen av korrosionen med en mycket pessimistisk ansats och ett mest troligt fall. I det första fallet blir frättdjupet några millimeter, men kommer troligen inte att uppgå till mer än några tiondels millimeter på 100 000 år.

**Kopparkorrosion efter vattenmättnad; bakteriell korrosion:** Normalt utgör inte bakteriell reduktion av sulfat till sulfid något hot mot kapselns integritet, eftersom detta inte leder till förhöjda halter av löst sulfid i grundvattnet. Halterna löst sulfid som kan finnas i närområdet styrs av lösligheten av sulfidmineraler i bentoniten och i berget är halterna i allmänhet betydligt under  $5 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$ . Vid dessa låga halter är transporten av sulfid från eller genom bufferten mycket långsam och kommer att helt styra korrosionsförloppet.

Ett värsta fall skulle vara om bakterierna bildade en biofilm på kapselytan eller fanns i bufferten nära kapseln. Korrosionsförloppet skulle då styras av transporten av sulfat till kapseln. Detta kan leda till betydligt förhöjd korrosion, eftersom transporten av sulfat förväntas vara betydligt snabbare än sulfidtransporten genom att sulfathalterna i bentoniten kan vara upp till tiotals  $\text{mmol/dm}^3$ .

En studie av förutsättningarna för tillväxt av sulfatreducerande bakterier i kompakterad bentonit genomfördes 1995 av Pedersen et al /Motamedi et al, 1996/. Resultaten visade att överlevnaden av sulfatreducerande bakterier i bentonit beror av tillgängligheten på vatten och att om en bentonit av hög kvalitet kompakteras till  $2 \text{ g/cm}^3$ , motsvarande en vattenaktivitet på 0,96, överlever inte sulfatreducerande bakterier. Det skulle alltså inte finnas någon mekanism för bakteriell korrosion innanför bentonitbufferten, om en vattenaktivitet på 0,96 eller lägre kan upprätthållas. Nuvarande kunskap tyder på att bakteriell sulfidkorrosion kan uteslutas i förvarsmiljön.

**Sulfatkorrosion:** Oorganisk sulfatkorrosion av koppar har bedömts som uteslutet under förvarsförhållanden eftersom reaktionen är kinetiskt hämmad. /Korrosionsinstitutet, 1983; Grauer, 1991/.

**Inverkan av temperatur:** Temperaturen i förvaret kommer under det oxiderande skedet att vara förhöjd med en högsta temperatur av 90 °C på kopparytan. Temperaturhöjningen från 20 °C till 90 °C ökar korrosionshastigheten för koppar med en faktor hundra utifrån den enkla uppskattningen att reaktionshastigheten fördubblas med tio graders temperaturökning. Detta är emellertid av underordnad betydelse, eftersom diffusionen av reaktanter är styrande för hastigheten och diffusiviteten påverkas i betydligt mindre grad av temperaturen. Inverkan av temperaturen på de kemiska jämvikterna för korrosionsreaktionerna är helt försumbar för det temperaturintervall som är aktuellt i förvaret.

**Inverkan av kemiska förändringar vid glaciationer:** Vid glaciation kan det inte helt uteslutas att syrehaltigt vatten tidvis tränger ned i krosszoner och sprickor med hög konduktivitet. Detta har diskuterats av Ahonen och Vieno /Ahonen och Vieno, 1994/.

Under en isavsmältning kan syrehaltigt vatten tänkas tränga ned i förvaret. Syrehalten i vattnet kan uppskattas till 10 mg/l. Om man förutsätter att en 100 000 års period har sammanlagt 5 000 år av isavsmältning, då syresatt vatten tränger ned i förvaret och ett ekvivalent flöde av 1 liter per år, kommer totalt cirka 400 g koppar att korrodera. Detta motsvarar vid jämn avfrätning 2,6 µm. Med den gropfrättningsfaktor på 5 /Korrosionsinstitutet, 1983/ som använts i KBS-3 utredningen skulle den djupaste frätgropen bli 13 µm.

Angreppet kommer troligen inte att vara jämnt fördelat, då syret kan tänkas komma genom tunneln och angripa endast kapselns lock. Lockkorean utgör cirka 5 procent av hela arean och den djupaste frätgropen under dessa omständigheter blir 260 µm.

### **Tidsperspektiv**

I ett längre tidsperspektiv har endast sulfidkorrosionen betydelse. Sulfidkorrosion kommer att pågå så länge det finns sulfid och metallisk koppar tillgängligt.

### **Naturliga analogier**

Korrosion av koppar under oxiderande förhållanden kan studeras på arkeologiska föremål. Sådana studier har genomförts dels för att bedöma risken för gropfrätning /Bresle et al, 1983; Hallberg et al, 1984/, dels för att bedöma allmätkorrosion under längre tider /Hallberg et al, 1988/. Bresle et al studerade arkeologiska bronsföremål för att bestämma gropfrättningsfaktorn vid förläggning i jord under långa tider. Resultaten tydde på att den troliga gropfrättningsfaktorn låg i intervallet 2–5. Hallberg et al /1984/ genomförde en liknande studie av tre jordningsplåtar till åskledare. Dessa hade legat nedgrävda i 50 till 80 år. Hallberg et al fann en gropfrättningsfaktor på 5 i två av fallen och ingen gropfrätning i det tredje fallet. Hallberg et al /1988/ undersökte en bronskanon från regalskeppet Kronan. Kanonen hade legat begravd med mynningen nedåt i bottensedimenten i Östersjön sedan 1676. Hallberg et al uppskattade korrosionshastigheten till  $1,5 \cdot 10^{-5}$  mm/år. Detta motsvarar 1,5 mm på 100 000 år och med en gropfrättningsfaktor på 5 ett största frättdjup på 7,5 mm.



### Sammanfattning av osäkerheter

**Kopparkorrosion efter vattenmättnad:** För de nu kända förhållandena på djupförvarsnivå beräknas kapseln förbli intakt under mycket lång tid, beräkningsmässigt betydligt längre än konstruktionsförutsättningarnas 100 000 år. Osäkerheterna i bedömningar av förvarets utveckling över långa tidsperioder är stora och koppartjockleken har därför valts med en stor säkerhetsfaktor för att livslängden på 100 000 år ska uppnås.

Även om det är stora osäkerheter i bedömningarna över stora tidsperioder, är det mycket osannolikt att allmän korrosion eller gropfrätning skulle kunna leda till kapselgenombrott under de 100 000 år, som kapseln konstruerats för. Osäkerheterna är alltså små när det gäller bedömningen att kapselns livslängd vad gäller korrosionsangrepp är minst 100 000 år.

### Hantering i säkerhetsanalysen

**Basscenario:** Korrosion i enlighet med den intransport av korrodanter som kan förväntas i basscenariot.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Korrosion i enlighet med den intransport av korrodanter som kan förväntas i klimatscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

### 3.7.6 Spänningskorrosion kopparkapsel



Figur 3-14. Spänningskorrosion kopparkapsel.

### Överblick

Spänningskorrosion beskrevs allmänt i avsnitt 3.7.3. För koppar kan förhöjda halter av nitriter och ammonium orsaka spänningskorrosion i djupförvarsmiljö.

### **Allmän beskrivning, modellstudier/experimentella studier**

Vid KBS-2 utredningen /Korrosionsinstitutet, 1978/ ansågs risken för spänningskorrosion var obefintlig för syrefri, ren koppar. Senare undersökningar, som diskuterades i KBS-3 utredningen /Korrosionsinstitutet, 1983/, har visat att risken inte helt kan uteslutas för de aktuella kopparkvaliteterna och för den aktuella förvarsmiljön. Kväveföreningar, som nitrit och ammoniak kan ge upphov till spänningskorrosion i koppar. Studier som SKB genomfört, har dock visat att spänningskorrosion måste bedömas som osannolik för de förväntade förvarsförhållandena. Dessa slutsatser var baserade på resultat från SSRT-provning (slow strain rate testing) /Benjamin et al, 1988/.

### **Tidsperspektiv**

Om spänningskorrosion förekommer, sker det troligen under ett tidigt skede i förvaret då oxiderande förhållande fortfarande råder (< 300 år).

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Det finns inga belägg för att spänningskorrosion skulle kunna förekomma i förvarsmiljön men möjligheten kan inte helt uteslutas med nuvarande kunskaper. Några kriterier för under vilka förhållanden spänningskorrosion uppträder och under vilka förhållanden spänningskorrosion är omöjlig finns inte.

Dragspänningar i kopparkapseln är en nödvändig förutsättning och eftersom kapseln befinner sig under yttre övertryck, är det inte troligt att spänningskorrosion skulle leda till genombrott på kapseln. Detta skulle rimligen kräva genomgående dragspänningar i hela kapselväggen och en sådan situation bedöms inte kunna uppstå under normala förhållanden i förvaret.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Spänningskorrosion kan med nuvarande kunskaper inte modelleras. Processen kan med största sannolikhet försummas.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

## **3.8 Radionuklidtransport**

Se avsnitt 2.8, "Radionuklidtransport i bränsle/kapselns hålrum".



### 3.9 Referenser

**Ahonen L, Vieno T, 1994.** Effects of glacial meltwater on corrosion of copper canisters. Report YJT-94-13, Nuclear Waste Commission of Finnish Power Companies.

**Benjamin L A, Hardie D, Parkins R N, 1988.** Stress corrosion resistance of pure coppers in ground waters and sodium nitrite solutions. *Br. Corros. J.* **88** (1988) 89–95.

**Billington D S, Crawford J H, 1961.** Radiation damage in solids. Princeton University Press, Princeton, New Jersey.

**Bjurström H, Bruce A, 1997.** Temperaturer i en kapsel enligt TR 95-02, en första uppskattning. SKB Inkapsling PPM 97-3420-28, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Bjurström H, Bruce A, 1998.** Temperaturer i en kapsel enligt TR 95-02, etapp 2. SKB Inkapsling PPM 98-3420-30, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Blackwood D J, Naish C C, 1994.** The effect of galvanic coupling between the copper outer canister and the carbon steel inner canister on the corrosion resistance of the Advanced Cold process canister. SKB Inkapsling PR 95-04, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Blackwood D J, Naish C C, Rance A P, 1994.** Further research on corrosion aspects of the Advanced Cold Process Canister. SKB Inkapsling PR 95-05, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Blackwood D J, Henshaw J, Platts N, Hilditch J P, 1995.** Stress corrosion cracking of the advanced cold process canister: Carbon steel in nitric acid vapour. SKB Inkapsling PR 96-05, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Bond A E, Hoch A R, Jones G D, Tomczyk A J, Wiggin R W, Worraker W J, 1997.** Assessment of a spent fuel disposal canister. Assessment studies for a copper canister with cast steel inner component. SKB TR 97-19, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Bresle Å, Saers J, Arrhenius B, 1983.** Studies on pitting corrosion on Archaeological bronzes. SKB TR 83-05, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Börgesson L, 1992.** Interaction between rock, bentonite, buffer and canister. FEM calculations of some mechanical effects on the canister in different disposal concepts. SKB TR 92-30, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Börgesson L, Hernelind J, 1998.** Kapselpåverkan vid inhomogena svälltryck från bufferten. FEM-beräkningar av effekten av ojämn vattentillgång i berget. SKB Inkapsling PPM 98-3420-33, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Cakmak E, 1994.** Beräkningar av maximal töjning i kopparbehållare för slutförvaring av utbränt kärnbränsle. SKB Inkapsling PPM 95-3420-01, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Ekberg M, 1995.** Lagringsbehållare för utbränt kärnbränsle, kollapstryck hos gjuten cylinder. SKB Inkapsling PPM 95-3420-11, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Grauer R, 1991.** The reducibility of sulphuric acid and sulphate in aqueous solution (translated from German). SKB TR 91-39, Svensk Kärnbränslehantering AB.

- Hallberg R, Engvall A-G, Wadsten T, 1984.** Corrosion of copper lightning conductor plates. *Br. Corros. J.* Vol. 19:2, pp 85–88.
- Hallberg R O, Östlund P, Wadsten T, 1988.** Inferences from a corrosion study of a bronze cannon, applied to high level nuclear waste disposal. *Applied Geochemistry*, Vol. 3, pp 273–280.
- Håkansson R, 1995a.** Doseratsberäkningar för kapsel med använt kärnbränsle. Studsvik Nuclear Arbetsrapport N(R)-95/026.
- Håkansson R, 1995b.** Beräkningar av doshastighet 1 m från kapsel med använt kärnbränsle samt 1 m från bart använt bränsleelement. Studsvik Nuclear Arbetsrapport N(R)-95/050.
- Håkansson R, 1996.** Beräkning av nuklidinnehåll, resteffekt, aktivitet samt doshastighet för utbränt kärnbränsle. Studsvik Nuclear Arbetsrapport N(R)-96/079.
- Knopp U, 1996.** Feasibility Study of a Transport cask for the Transport of Canisters for Encapsulated Spent Fuel to Final Disposal. For canister with cast insert. SKB Inkapsling PR 96-07, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Korrosionsinstitutet och dess referensgrupp, 1978.** Copper as canister material for unprocessed nuclear waste – evaluation with respect to corrosion. KBS TR 90.
- Korrosionsinstitutet och dess referensgrupp, 1983.** Corrosion resistance of a copper canister for nuclear fuel. SKBF/KBS TR 83-24, Svensk Kärnbränsleförsörjning AB.
- Marsh G P, 1990.** A preliminary assessment of the advanced cold process canister. Harwell Laboratory, AEA Industrial Technology, Report AEA-InTec-0011.
- Mattsson E, 1997.** Utvärdig korrosion hos kopparkapslar i avvaktan på slutförvar och under slutförvarets inledningskede. SKB Inkapsling PPM 97-3420-22, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Motamedi M, Karnland O, Pedersen K, 1996.** Survival of sulfate reducing bacteria at different water activities in compacted bentonite. *FEMS Microbiology Letters* 141 (1996) 83–87.
- Pedersen K, Motamedi M, Karnland O, 1995.** Survival of bacteria in nuclear waste buffer materials. The influence of nutrients, temperature and water activity. SKB TR 95-27, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Porter L F, 1960.** Radiation effects in steel. *In: Nuclear Materials Applications.* ASTM Special Technical Publication No. 276, pp 147–196.
- Reed D T, van Konynenburg R A, 1991a.** Effect of ionizing radiation on the waste package environment. High Level Waste Management II, American Nuclear Society, La Grange Park, IL, 1396–1403.
- Reed D T, van Konynenburg R A, 1991b.** Progress in evaluating the corrosion of candidate HLW container metals in irradiated air-steam mixtures. *Proceedings Nuclear Waste Packaging, Focus '91*, American Nuclear Society, La Grange Park, IL, 185–192.

- Renström P, 1997.** Calculation of the fuel temperature in vacuous storage canisters made of copper with cast steel inserts. SKB Inkapsling PPM 97-3420-23, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Smart N, Rance A, Blackwood D, 1997.** Corrosion aspects of the copper-steel/iron process canister: Consequences of changing the material for the inner container from carbon steel to cast iron. SKB Inkapsling PR 97-04, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Taxén C, 1990.** Corrosion on copper in chloride containing waters. A thermodynamic study. SKB Inkapsling PR 94-02, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Werme L, Sellin P, Kjellbert N, 1992.** Copper canisters for nuclear high level waste disposal. Corrosion aspects. SKB TR 92-26, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Werme L O, 1997.** Materialförändringar av betydelse för kapselns långtidsbeständighet. SKB Inkapsling PPM 97-3420-24, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Werme L O, 1998.** Konstruktionsförutsättningar för koppar/järn kapsel för deponering av använt kärnbränsle. SKB R-98-08, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Wersin P, Spahiu K, Bruno J, 1994a.** Time evolution of dissolved oxygen and redox conditions in a HLW repository for spent nuclear fuel. SKB TR 94-02, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Wersin P, Spahiu K, Bruno J, 1994b.** Kinetic modelling of bentonite-canister interaction. Long-term predictions of copper canister corrosion under oxic and anoxic conditions. SKB TR 94-25, Svensk Kärnbränslehantering AB.

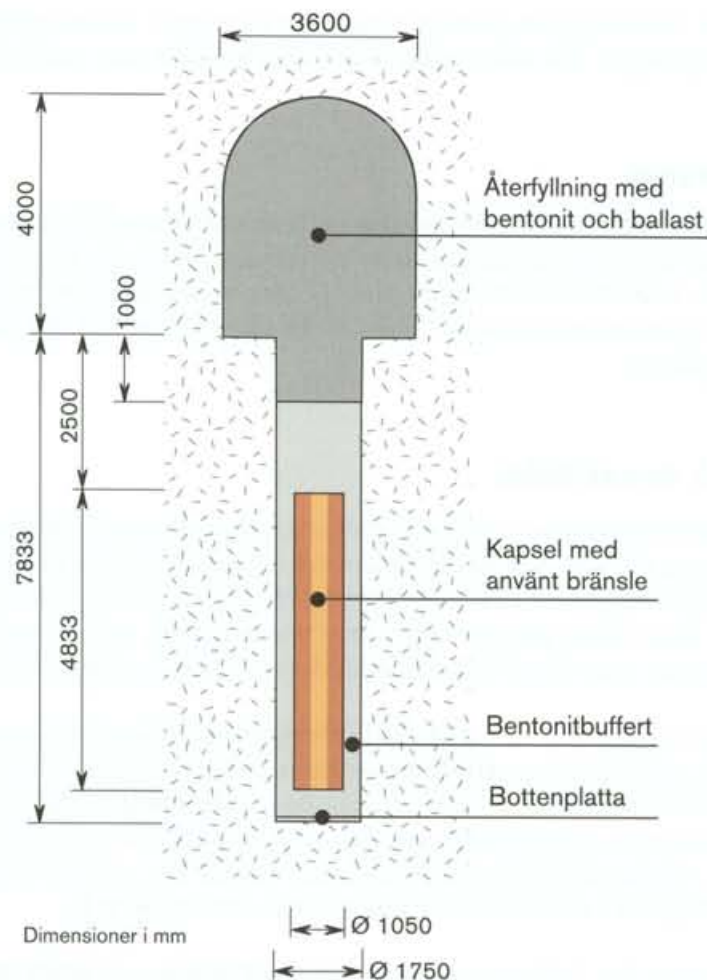
## 4 Buffert/återfyllning

### 4.1 Beskrivning av buffert och återfyllning

#### 4.1.1 Allmänt

Kopparkapslarna kommer vid deponeringen att omges av en buffert av bentonitlera, se figur 4-1. Vid deponeringen bildas av tekniska skäl spalter mellan kapsel och buffert samt mellan buffert och berg. Den inre spalten fylls med vatten och den yttre med bentonitpellets och vatten.

Tunneln ovanför deponeringshålet kommer efter deponeringen att återfyllas med ett material som anpassas till de kemiska förhållandena på förvarsplatsen.



*Figur 4-1. Deponeringshål med bentonitbuffert och kapsel. Figuren visar också den återfyllda tunneln ovanför deponeringshålet.*

### **Buffertmaterial**

Bufferten består av MX 80 bentonit, en naturlig lera från Wyoming eller South Dakota i USA. Beteckningen MX 80 är ett handelsnamn och specificerar en viss kvalitet och kornstorlek av torkad och mald bentonit.

MX 80 bentonit består till 65–80 procent av smektitmineralet montmorillonit där lerpartiklarna är mindre än 2 µm. Kemiskt kan montmorillonit beskrivas som en s k polyelektrolyt, där utbytbara positiva joner är associerade till de negativt laddade lerpartiklarnas ytor. Leran har den karakteristiska egenskapen att svälla i kontakt med vatten. De utbytbara jonerna i MX 80 domineras av natrium och materialet kallas därför också natriumbentonit. Vattenmättad buffert innehåller ca 25 viktprocent vatten. Vattenmolekylerna är absorberade i materialet och vattentransport sker huvudsakligen genom diffusion.

I MX 80 bentonit finns också bland annat mineralen kvarts (cirka 15 procent) och fältspat (5–8 procent). Kemiskt viktiga komponenter utöver mineralen är karbonater (t ex kalcit), sulfater, fluorider, sulfider (t ex pyrit), järn(II) och organiskt material.

Bentoniten får efter bevätning ett porvatten med karakteristisk sammansättning som beror av sammansättningen hos bentoniten och hos det vatten som används för bevätning.

### **Återfyllningsmaterial**

Återfyllningsmaterialet består av en blandning av bentonitlera och bergkross. Proportionerna anpassas efter de kemiska förhållandena på förvarsplatsen så att återfyllningen får önskade egenskaper. I SR 97 har en sådan platspecifik anpassning inte gjorts. I stället används en typisk sammansättning som består av 15 viktprocent MX 80 bentonitlera och 85 viktprocent bergkross.

#### **4.1.2 Överblick av variabler**

I systemdelen buffert/återfyllning begränsas bufferten inåt av gränsytan mot kapseln, utåt och nedåt av gränsytor mot deponeringshålet och uppåt av gränsytan mot återfyllningen. Återfyllningen begränsas i rummet av utbredningen av återfyllda tunnelsystem och berggrum. Här finns också pluggar som bland annat har till uppgift att hydrauliskt försluta tunnelsystemet, men dessa har inte inkluderats i beskrivningen i SR 97.

Bufferten så som den avgränsas av variabeln **buffertgeometri** karakteriseras termiskt av **temperaturen** och strålmässigt av **strålintensiteten**, huvudsakligen  $\gamma$ - och neutronstrålning. Hydrauliskt karakteriseras bufferten av dess **vattenhalt**, ibland också av **gashalter** samt av vattentryck, vattenflöde, gastryck och gasflöde. De senare fyra, som är intressanta främst i skedet då bufferten mättas med vatten, har samlats i variabeln **hydrovariabler**. Mekaniskt karakteriseras bufferten av ett **svälltryck**.

Det kemiska tillståndet hos bufferten anges av **smektithalten** och **smektitsammansättningen** som är själva lermineralets sammansättning, inklusive de jonslag som är associerade till ytan, olika **föroreningshalter** och en **porvattensammansättning**.

För återfyllningen används samma uppsättning variabler som för bufferten. Bergkrosset, som ju utgör 85 procent av återfyllningen, inkluderas i variabeln **föroreningshalter**.

Samtliga variabler definieras i tabell 4-1.

**Tabell 4-1. Variabler i buffert/återfyllning.**

<b>Geometri</b>	Geometriska mått för buffert/återfyllning. En beskrivning av bland annat begränsningsytor inåt mot kapseln och utåt mot geosfären.
<b>Porgeometri</b>	Porgeometri som funktion av tid och rum i buffert och återfyllning. Ofta anges porositet, dvs den andel av volymen som inte upptas av fast material.
<b>Strålintensitet</b>	Intensitet av ( $\alpha$ -, $\beta$ -,) $\gamma$ - och neutronstrålning som funktion av tid och rum i buffert (och återfyllning).
<b>Temperatur</b>	Temperatur som funktion av tid och rum i buffert och återfyllning.
<b>Smektitihalt</b>	Smektitihalt som funktion av tid och rum i buffert och återfyllning.
<b>Vattenhalt</b>	Vattenhalt som funktion av tid och rum i buffert och återfyllning.
<b>Gashalter</b>	Gashalter (inklusive eventuella radionuklider) som funktion av tid och rum i buffert och återfyllning.
<b>Hydrovariabler</b>	Flöden och tryck för vatten och gas som funktion av tid och rum i buffert och återfyllning.
<b>Svälltryck</b>	Svälltryck som funktion av tid och rum i buffert och återfyllning.
<b>Smektit-sammansättning</b>	Smektitens kemiska sammansättning (inklusive eventuella radionuklider) i tid och rum i buffert och återfyllning. Även material sorberat till smektitytan ingår i denna variabel.
<b>Porvatten-sammansättning</b>	Porvattnets sammansättning (inklusive eventuella radionuklider och lösta gaser) i tid och rum i buffert och återfyllning.
<b>Föreningshalter</b>	Halter av föroreningar i tid och rum i buffert och återfyllning. Till föroreningar räknas även mineral, förutom smektit. I återfyllningen räknas bergskrosset till föroreningarna.

## 4.2 Översikt av processer

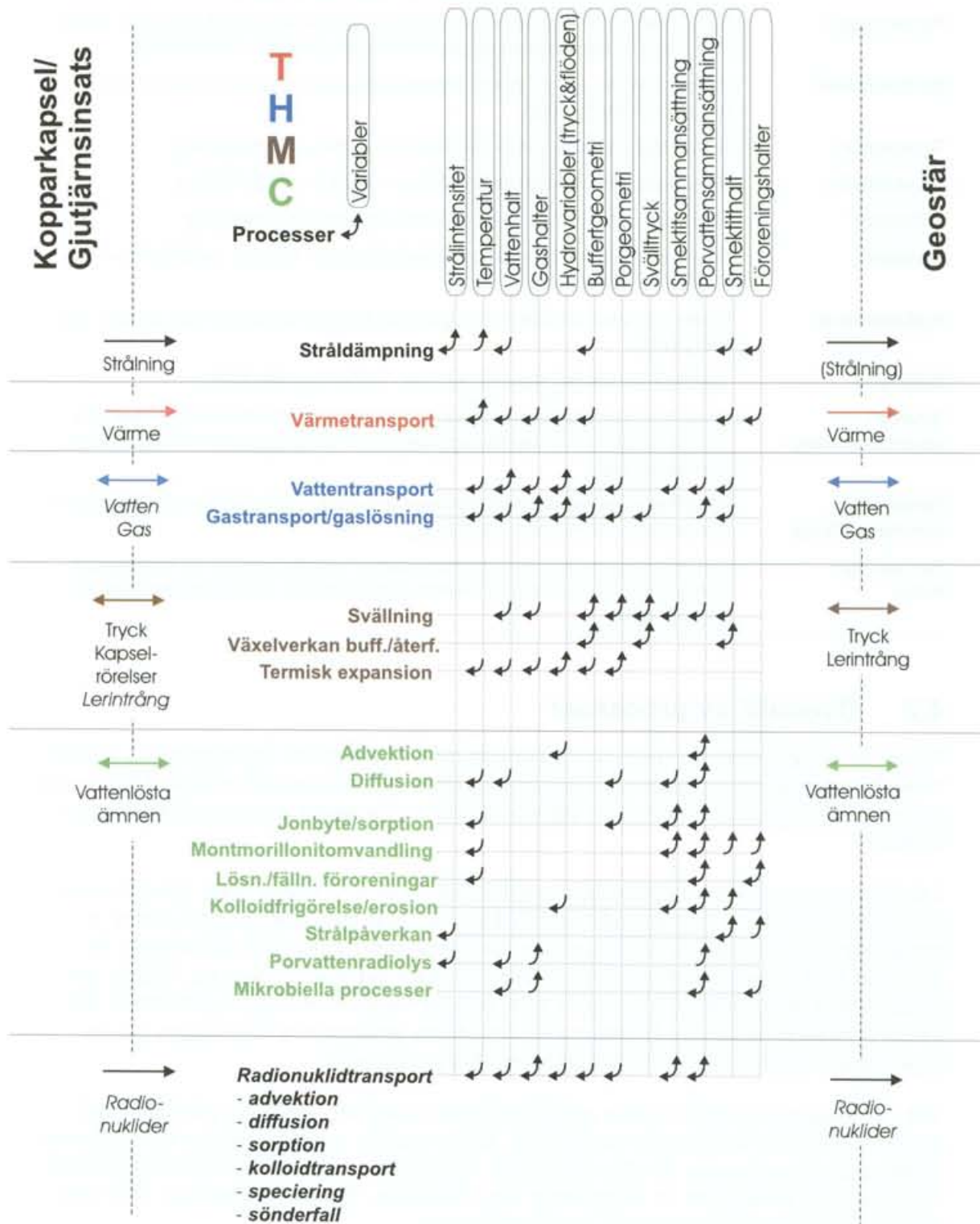
Vid inplaceringen kommer bufferten i kontakt med den varmare kapselytan och genom *värmetransport* sprids värmeenergin genom bufferten och temperaturen ökar. Den  $\gamma$ - och neutronstrålning som tränger ut ur kapseln minskar i intensitet genom *stråldämpning* i bufferten.

I buffertens porer råder ursprungligen ett kapillärt undertryck som leder till att *vatten transporteras* in från det omgivande berget. Efter att bufferten mättats med vatten är transporten mycket långsam. *Gastransport* kan förekomma vid mättnadsförloppet då ånga kan flöda från buffertens varmare delar för att kondensera i de yttre, kallare partierna. Ursprungligen finns även luft i bufferten som genom att lösas i porvattnet kan lämna bufferten; *gaslösning*. Efter vattenmättnad kan gastransport förekomma om en kapsel skulle skadas med åtföljande vätgasbildning i kapseln.

Vid vattenupptaget *sväller* buffert och återfyllning varvid ett svälltryck utbildas. Svälltrycket blir olika i buffert och återfyllning. Detta medför att dessa *växelverkar mekaniskt*. Svälltrycket är avgörande för den mekaniska växelverkan mellan kapsel och buffert som bland annat kan innebära att kapseln rör sig i bufferten. Vid uppvärmningen kan framförallt porvattnet utvidgas genom *termisk expansion*.

Den kemiska utvecklingen i buffert och återfyllning bestäms av en rad transport- och reaktionsprocesser. Vattenlösta ämnen kan transporteras genom *advektion* och *diffusion*. I bufferten förekommer advektion nästan uteslutande under vattenmättnadsförloppet, därefter dominerar diffusion. Genom *jonbyte/sorption* kan buffertens ursprungliga innehåll av joner på lerpartiklarnas ytor ersättas av andra jonslag. Kemisk *smektitnedbrytning*

# Buffert/Återfyllning



Figur 4-2. THMC-diagrammet för buffert/återfyllning. Processer och interaktioner i kursiv stil förekommer endast då kopparkapselns isolering är bruten.

kan förekomma bl a i form av illitisering. Föroreningar omsätts i bufferten bland annat genom olika *lösnings-/fällningsreaktioner*. Vid svällningen tränger bufferten ut i det omgivande bergets sprickor och kan där tänkas *bilda kolloider* som kan föras bort av grundvattnet vilket kan leda till en successiv *erosion* av bufferten. Leran kan omvandlas genom *strålpåverkan* och porvattnet kan sönderdelas av *radiolys*. Slutligen kan *mikrobiella processer* tänkas förkomma i buffert/återfyllning.

Efter vattenmättnad förväntas *radionuklidtransport* i bufferten ske uteslutande genom *diffusion* i buffertens porer, möjligen också på lerpartiklarnas ytor. Varken *advektion* eller *kolloidtransport* förväntas i en mättad buffert. Radionuklider kan *sorberas* till lerpartiklarnas ytor. Avgörande för detta är radionuklidens kemiska form som bestäms av den kemiska miljön i bufferten genom processen *speciering*. Det *radioaktiva sönderfallet* bestämmer tillsammans med transportförhållandena i vilken utsträckning radionuklider från en trasig kapsel hinner sönderfalla innan de når buffertens yttre gräns.

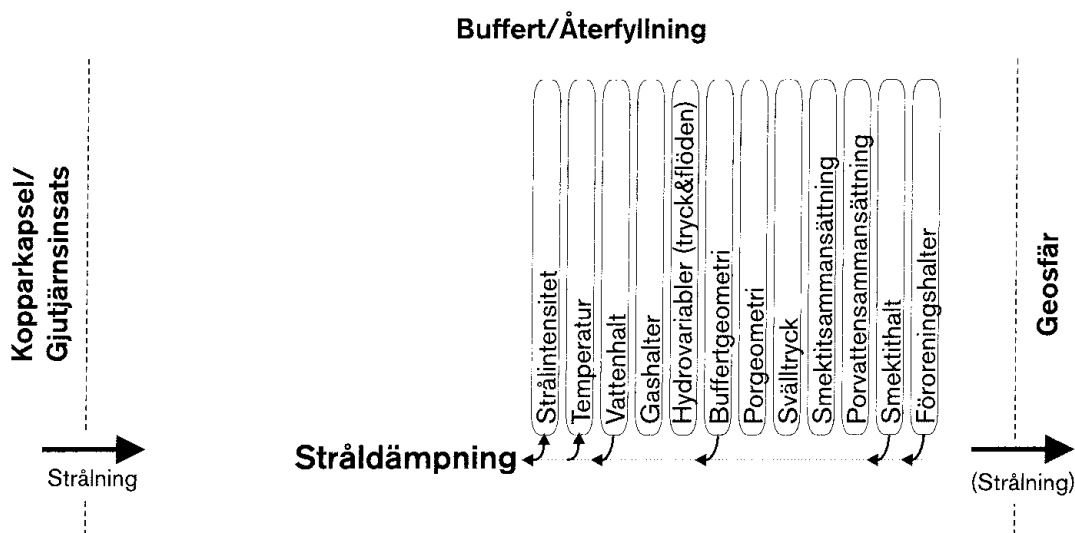
I återfyllningen sker i princip samma processer som i bufferten, dock ibland i en annan omfattning. Dessutom spelar bergkrosset (definierat som förorening i återfyllningen) en delvis annan roll än buffertens föroreningar, bl a genom att bidra till sorption.

Det fullständiga THMC-diagrammet för buffert/återfyllning visas i figur 4-2.

### 4.3 Strårelaterade processer

Förutom stråldämpning, se nedan, förekommer radioaktivt sönderfall hos eventuella radionuklider i bufferten. Radioaktivt sönderfall beskrivs i kapitlet som behandlar bränsle/hålrum.

#### 4.3.1 Stråldämpning/värmealstring



Figur 4-3. Stråldämpning/värmealstring.

#### Överblick, allmän beskrivning

$\gamma$ - och neutronstrålning från kapseln dämpas (attenueras) i bufferten. Dämpningens storlek beror främst av buffertens densitet och vattenhalt. Resultatet blir ett strålfält i bufferten som bland annat kan leda till radiolys och en marginell påverkan på montmorilloniten. Den strålning som inte dämpas i bufferten tränger ut i närfältberget.



Dämpning av  $\gamma$ - och neutronstrålning kommer att höja buffertens temperatur, men effekten är försumbar jämfört med andra temperaturhöjande processer. Strålningen har betydelse för de kemiska processerna *strålinducerad montmorillonitnedbrytning* och  *$\gamma$ -radiolys av porvatten*.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Dämpning av  $\gamma$ - och neutronstrålning kan beräknas teoretiskt för ett godtyckligt material om geometri och sammansättning är kända, se t ex de modellstudier som nämns för motsvarande process i kapseln. Experimentella studier av stråldämpning i bentonit redovisas i avsnitt 4.7.8.

### **Tidsperspektiv**

Se motsvarande process för kapseln.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

**Förståelse:** Förståelsen av processen är tillräcklig för säkerhetsanalysens behov.

**Data:** Data för att kvalitativt beskriva processen är kända med tillräcklig noggrannhet för säkerhetsanalysens behov.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** En enkel beräkning av dosrat på buffertens in och utsida genomförs. Värmegenerering försummas.

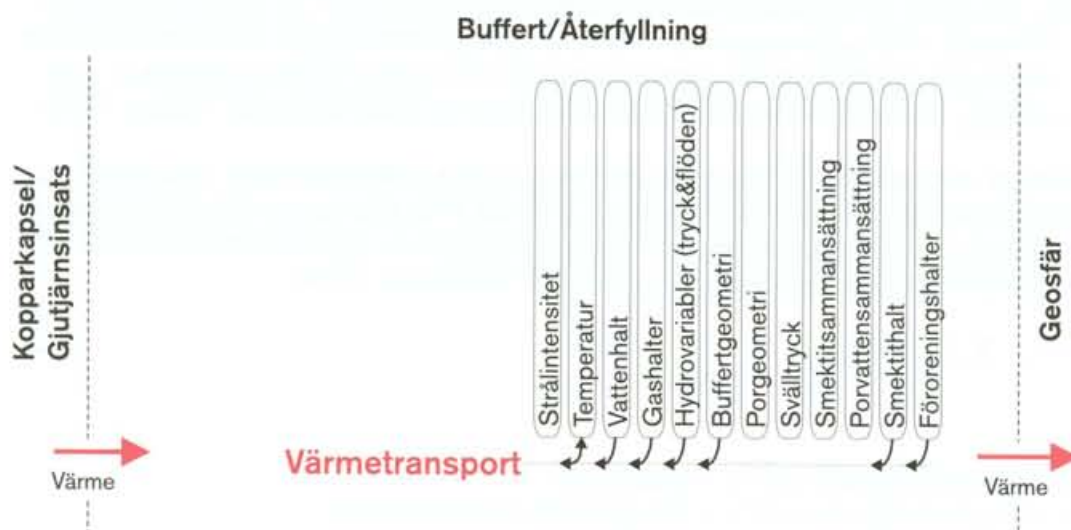
**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

## 4.4 Termiska processer

### 4.4.1 Värmetransport



Figur 4-4. Värmetransport.

#### Överblick

Värme transporteras i buffert och återfyllning huvudsakligen genom ledning. Innan full vattenmättnad uppnåtts kan även ångströmning i bufferten bidra till värmetransporten.

Värmeledningsförmågan beror i första hand av bentonitens sammansättning och vattenhalt.

#### Allmän beskrivning

Värme transporteras från kapselytan till bufferten, genom bufferten och slutligen från bufferten till berget, dels direkt, dels via tunnelåterfyllningen. Eventuellt sker transporten under någon tidsperiod via spalter mellan kapsel och buffert och mellan buffert och berg. För systemets funktion är effektiviteten hos värmetransporten genom buffertområdet viktig, eftersom den har betydelse för två viktiga temperaturer: den på kapselytan och den i själva bufferten. Betydelsen av tunnelåterfyllningens värmetransportkapacitet är däremot liten från dessa synpunkter och behandlas bara översiktligt i det följande.

När bufferten vattenmättats och svällt ut så att alla spalter och fogar är fyllda, sker all värmetransport genom ledning. Innan full vattenmättnad sker en liten del av värmetransporten i buffertmaterialet genom förångning, ångflöde och kondensation. I ett tidigt skede kan dessutom spalter fyllda med vatten eller luft och vattenånga förekomma. I vattenfyllda spalter sker värmetransporten över spalten genom strömning och ledning, i spalter fyllda med luft och vattenånga delvis också genom strålning. Efter någon vecka är värmetransporten genom bufferten i stort sett oberoende av buffertens värmekapacitet och värmeledningen i bufferten kan approximativt beskrivas med den tidsberoende värmeledningsekvationen:

$$\nabla \cdot (\lambda \nabla T) = 0$$

Den viktigaste parametern är således värmeledningsförmågan eller värmeledningstalet,  $\lambda$ , hos olika delar av systemet. Värmeledningsförmågan hos bentonit beror i första hand på densitet, vattenmättnadsgrad och mineralsammansättning. För vattenmättad MX-80 bentonit som svällt ut till avsedd buffertdensitet, dvs 2000 kg/m<sup>3</sup>, är värmeledningstalet ca 1,2 W/(m·K). Vid appliceringen är blockens vattenmättnad lägre, men torrdensiteten högre, vilket ger ungefär samma värmeledningstal. För spalter fyllda med vatten- och luft/vattenånga är värmeledningstalen 0,60 respektive ca 0,025 W/(m·K) /Weast, 1973/.

**Inverkan av vattenhalt:** För bentonit med hög montmorillonithalt kan man uppskatta värmeledningstalet med hjälp av uttrycken i (1-2 till 1-4), som anger värmeledningstalet som funktion av vattenmättnadsgraden  $S_r$  och porositeten  $n$ , som tillsammans med mineraldensiteten bestämmer buffertens densitet /Knutsson, 1983/.

$$\lambda = \lambda_0 + K_e (\lambda_1 - \lambda_0) \quad (1-2)$$

där

$\lambda_0$  = värmeledningstalet vid  $S_r = 0$  (torrhet)

$\lambda_1$  = värmeledningstalet vid  $S_r = 100$  procent (vattenmättnad)

$K_e = 1 + \log S_r$

$\lambda_0$ , och  $\lambda_1$  bestäms enligt (1-3) och (1-4):

$$\lambda_0 = 0.034 \cdot n^{-2.1} \quad (1-3)$$

$$\lambda_1 = 0.56^n \cdot 2^{(1-n)} \quad (1-4)$$

Ekvation (1-2) ger värden med en uppskattad noggrannhet av 20 procent.

Inverkan av densiteten uttrycks implicit i form av porositeten  $n$ . För vattenmättad högkompakterad MX-80 bentonit med densiteten 2000 kg/m<sup>3</sup> vid vattenmättnad är  $n = 0,44$  och blir värmeledningstalet enligt Ekv. (1-4) 1,14 W/(m·K). Reduceras vattenmättnadsgraden till 50 procent blir värmeledningstalet 0,85 W/(m·K).

**Inverkan av temperatur och tryck:** Olika modeller har föreslagits för uppskattning av inverkan av ökande tryck och temperatur på värmeledningsförmågan hos bentonit /Knutsson, 1983/. De innebär en liten ökning av värmeledningstalet men effekten är inte tillräckligt verifierad för att kunna tillgodoräknas /Börgesson et al, 1994/. Också värmeledningsförmågan hos vatten och hos luft/vattenånga ökar något med temperaturen, men effekten är liten och kan försummas.

**Inverkan av montmorillonithalt:** Montmorillonithalten som sådan är inte avgörande för buffertens värmeledningsförmåga, eftersom de vanligaste accessoriska mineralen har likartad värmeledningsförmåga. Ett undantag är kvarts som har högre värmeledningsförmåga.

**Inverkan av konvektiv ångtransport på värmetransporten:** Bidraget till värmeledningen av konvektiv ångtransport kan uppskattas ge en ökning av värmeledningstalet med några tiondels W/(m·K) /Börgesson et al, 1994/. Svårigheten att studera processen experimentellt gör dock att man pessimistiskt bör försumma detta bidrag.

**Värmeledning i övergången kapsel/buffert:** Om spalten mellan buffert och kapselns mantelyta är vattenfylld sker transporten över spalten genom ledning med värmeledningstal som är ca 0,6 W/(m·K), vilket skiljer sig obetydligt från värmeledningstalet hos delvis omättad bentonit. Är spalten gasfylld blir värmeledningstalet ca 0,025 W/(m·K) och ett betydande temperatursprång kan uppstå mellan kapselyta och buffert. Språngets storlek beror på hur effektivt värme kan överföras genom strålning, dvs på kapselytans

emissivitet, och på hur väl kapseln kyls via andra ytor där ingen gasfylld spalt finns. Storleken av temperatursprånget kan vara upp till 30° C /Bjurström, 1997/. Vid gasfylld koncentrisk spalt kring kapselytan kan en oproportionellt stor del av kapseffekten komma att överföras till bufferten via kapselns basytor.

**Geometrins inverkan på värmetransporten.** Värmetransportmotståndet i bufferten beror av avståndet mellan kapsel och kapselhålsrand, vilket innebär förändringar i buffertens temperatur om kapselhålets dimensioner eller kapselns läge i kapselhålet skulle förändras. Efter vattenmättnad ger dock de variationer i geometri som kan uppstå på grund av blockutfall eller illa centrerad kapsel försumbara effekter. Detta gäller också effekter av momentana eller tidsberoende deformationer som kan förändra geometrin hos kapselhålet. Innan vattenmättnad kan illa centrerad kapsel ha betydelse för fördelning av gasfyllda volymer, och därmed för temperaturnivån och temperaturfördelningen i bufferten.

**Värmetransportens inverkan på buffertens temperatur.** Temperaturen på kapselhålets rand är så gott som oberoende av buffertens värmetransportkapacitet. Temperaturdifferensen mellan yttre och inre buffertrand, däremot, bestäms vid given kapseffekt av buffertens värmetransportkapacitet så att temperaturen i de inre delarna blir hög om värmeledningstalet är lågt, t ex på grund av uttorkning.

**Värmetransportens inverkan på återfyllningens temperatur.** Återfyllningens temperatur bestäms av det omgivande berget som har högre värmeledningsförmåga. Återfyllningens egen värmetransportkapacitet inverkar bara genom att närfältets genomsnittliga effektiva värmetransportmotstånd blir något större om transportkapaciteten är låg. Tunnlarnas volymsandel av närfältet är dock så liten att förändringar i återfyllningens bidrag till värmetransportmotståndet ger små effekter på temperaturen, såväl i återfyllningen själv som i bufferten.

### **Modellstudier/experimentella studier**

**Modellstudier:** Prediktering av temperaturutvecklingen i närfältet har gjorts analytiskt /Claesson och Probert, 1996/ och numeriskt /Thunvik och Braester, 1991; Hökmark, 1996/.

Temperaturen vid övergången buffert/kapsel når ett maximum efter ca 10 år. Vid övergången buffert/berg får man ett maximum efter ca 50 år.

De temperaturnivåer som kommer att gälla vid kapselhålsranden beror på bergets värmediffusivitet, på kapseffekten, tunnelavståndet och kapselavståndet. Med hjälp av analytiska lösningar kan man, för godtyckliga förvarsgeometrier och kapseffekter, uppskatta temperaturen i berget i olika positioner i förhållande till en kapsel /Claesson och Probert, 1996/. För en initial kapseffekt av 1680 W får man t ex en maximal temperaturhöjning av ca 56 °C på kapselhålsranden om avståndet mellan tunnarna är 40 m och avståndet mellan kapslarna är 6 m. Minskas effekten till 1050 W och tunnelavståndet minskas i samma proportion, dvs till 25 m, bli temperaturökningen istället cirka 47 °C /Hökmark, 1996/.

De temperaturnivåer som kommer att gälla i olika delar av bufferten och i övergången kapsel/buffert beror dessutom på buffertens värmeledningsegenskaper och på eventuell förekomst av spalter och torksprickor. Om man antar att det effektiva värmeledningstalet mellan kapsel och berg är 0,7 W/(m·K), blir temperaturdifferensen häremellan 20 °C till 25 °C vid en initial kapseffekt av ca 1050 W /Thunvik och Braester, 1991/. Differensen minskar efter ca 10 år och är ca 10 °C efter 100 år och bara någon grad efter 1000 år.

Temperaturutveckling i återfyllningen kan bestämmas med användande av analytiska metoder /Claesson och Probert, 1996/. I tunnelgolvet blir temperaturökningen ca 45 °C vid en kapsleffekt av 1680 W om tunnelavståndet är 40 m och kapselavståndet är 6 m. Minskas effekten till 1050 W och tunnelavståndet minskas i samma proportion, dvs till 25 m, blir temperaturökningen istället cirka 40 °C /Hökmark, 1996/.

Temperaturpulsens varaktighet är några tusen år. Efter 2000 år är temperaturöverskottet i förvaret ca 20 °C och efter 5000 år ca 15 °C /Hökmark, 1996/. Inga gradienter råder i närfältet efter ca 2000 år.

**Experimentella studier:** Fältförsök med simulering av förhållandena i deponeringshål av KBS3-typ i halv skala i Stripa visade vid provtagning efter 10 till 15 månader att brantstående sprickor uppstått från de elektriska värmarna till ca halva buffertjockleken i hål med låg vattentillförsel /Pusch och Börgesson, 1983/. Sprickorna utgick radiellt från den varma ytan och böjde av i 45° riktning in mot den vattenmättade ytzonen som följd av svälltrycksgenererade spänningar. Temperaturgradienten på de närmaste 3 cm avstånd var ca 5 °C/cm vilket visar att värmeöverföringen var dålig närmast värmarna. Detta orsakades dels av att den ursprungliga spalten på mindre än 1 millimeter ökats till några få millimeter, dels av uppkomsten av fina torksprickor och minskning av vattenmättnadsgraden. Inga verifierade kvantitativa samband mellan effektivt värmeledningstal och grad eller typ av uppsprickning finns för närvarande.

En viktig erfarenhet från laboratorieförsök och från fältförsöken i Stripa är att vattenmättnad av bentonitblock i kontakt med varandra leder till läkning av fogar och torksprickor /Pusch, 1980; Pusch et al, 1985a/. Det är alltså endast under vattenmättnadsperioden som bentonitblock kan åtskiljas av öppna fogar.

### **Tidsperspektiv**

Två tidsperspektiv finns: vattenmättnadsperspektivet och värmeproduktionsperspektivet. Tiden som kommer att förflyta innan full vattenmättnad beror bland annat på tryckförhållandena hos grundvattnet i närfältet. Processen uppskattas ta ett antal år, se avsnitt 4.5.1. Därefter sker all värmetransport genom ledning och under väldefinierade förhållanden med kända värmeledningstal. Innan dess kan värmetransporten påverkas genom förekomsten av spalter och fogar. Efter några tusen år har värmeproduktionen och därmed värmetransporten genom bufferten reducerats till någon procent av den ursprungliga.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

**Förståelse:** Värmeöverföringen från de varma kapslarna via bufferten till närfältberg och återfyllning är i princip en enkel process som kan beskrivas med hjälp av fundamentala fysikaliska lagar. Karaktären hos de delprocesser som medverkar till att transportera värmets är också kända och den teoretiska modelleringen av deras funktion grundar sig på välkänd fysik.

**Data:** Bestämningen av talvärden på enskilda termiska storheter kan inte göras på teoretisk väg på grund av materialens komplexa uppbyggnad och de transienta skeenden som äger rum såväl vid laboratorieförsök som i ett slutförvar och här finns osäkerheter. Den mest betydelsefulla storheten är värmeledningstalet  $\lambda$  som varierar i hela bufferten, både i det inledande skedet med ofullständig vattenmättnad och vid full vattenmättnad.

Temperaturfördelningen i berget, inklusive temperaturen på kapselhålsranden, är oberoende av buffertegenskaperna, och kan beräknas för givna värden på tunnelavstånd, kapselavstånd, initial kapseffekt och värmediffusivitet hos berget, vilket har demonstrerats genom jämförelse mellan numeriska och analytiska beräkningar /Claesson och Probert, 1996; Hökmark, 1996/, se vidare avsnitt 5.4.1.

### Hantering i säkerhetsanalysen

**Basscenario:** I SR 97 genomförs temperaturberäkningar för basscenariot för samtliga platser med platsspecifika förvarsutformningar. Temperaturen beräknas som funktion av tid för olika platser i förvaret. En dominerande osäkerhet i temperaturberäkningarna är den eventuella utbredningen av en gasfylld spalt mellan kapseln och bufferten. Variationsberäkningar kommer därför att genomföras, för att belysa betydelsen av en sådan spalt.

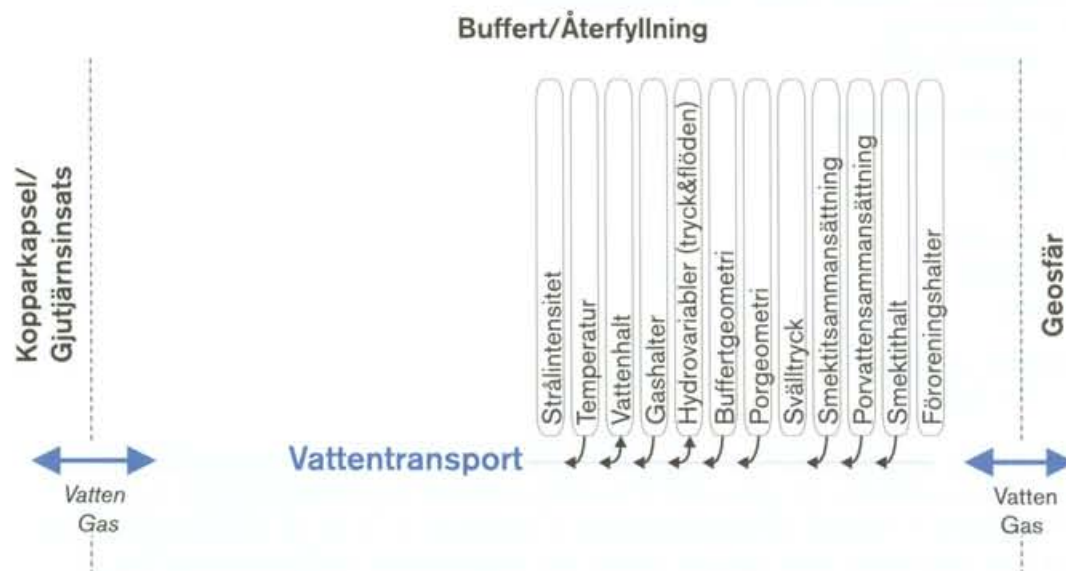
**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Temperaturförändringar i bufferten till följd av klimatförändringar diskuteras vid behov kvalitativt.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

## 4.5 Hydrauliska processer

### 4.5.1 Vattentransport vid omättade förhållanden



Figur 4-5. Vattentransport.

### Överblick

Vattentransport i bufferten vid omättade förhållanden är en komplicerad process som beror av bland annat temperatur, smektit- och vattenhalt i buffertens olika delar. Den viktigaste drivkraften för vattenmättnad vid förhållanden i ett djupförvar är ett kapillärt undertryck i buffertens porer som leder till vattenupptag från det omgivande berget. Tillgången på vatten i berget är också en avgörande faktor för hur processen utvecklas i tiden.



Den detaljerade beskrivningen av processen är komplicerad men hindrar inte att den kan modelleras med tillräcklig noggrannhet för säkerhetsanalysens behov. Alla detaljer i mätnadsförloppet är inte viktiga att känna för säkerhetsanalysen. Däremot är det viktigt att visa att full vattenmättnad nås för att kunna ge en tillförlitlig beskrivning av den långsiktiga utvecklingen efter mättnad.

### **Allmän beskrivning**

Här följer en detaljerad beskrivning av processen. Detaljeringsgraden är lämplig för att påvisa den allmänna förståelsen, men är inte nödvändig för säkerhetsanalysens behov av att t ex modellera huvuddragen i buffertens hydrauliska utveckling.

Följande hydrauliska delprocesser kan urskiljas:

- Transport av vatten i vätskefas, där transporten styrs och drivs av
  - A1) en tryckgradient i vattnet
  - A3) en osmotisk gradient
  - A4) gravitationen (kopplad till A1)
  - A5) en densitetsgradient (kopplad till A1)
- Transport av vatten i ångform, där transporten styrs och drivs av
  - B1) en tryckgradient i vattnet
  - B2) en temperaturgradient
  - B3) en osmotisk gradient
  - B4) gravitationen
  - B5) en densitetsgradient
- Fasövergångar mellan vatten och ånga genom:
  - C1) avdunstning
  - C2) kondensation
- Termisk expansion av
  - D1) vatten
  - D2) luft
- Kompression av
  - E1) vatten
  - E2) luft
- Transport i vatten av
  - F1) löst luft

Dessa processer är kopplade och i några fall olika sidor av samma process. De kan beskrivas och modelleras på olika sätt. En viktig variabel är porvattentrycket  $u_w$ . Det beskrivs vanligen i relation till porgasttrycket  $u_a$  såsom  $u_w - u_a$ .  $u_w - u_a$  är alltid negativ i en omättad jord och kallas med omvänt tecken för sugpotential. Sugpotentialen kan ur geoteknisk synpunkt beskrivas som summan av matris-sugpotentialen, som förenklat kan sägas komma från kapilläreffekter, och osmos-sugpotentialen, som beror av skillnader i jonkoncentration.

Förståelsen av de processer som driver vattentransport i omättade buffert- och återfyllningsmaterial och kunskapen om hur processerna påverkas av olika faktorer är inte heltäckande. Följande beskrivning avser i huvudsak de modeller som används för icke svällande jordmaterial /Fredlund och Rahardjo, 1993/. Om synsättet är tillräckligt heltäckande för att fullt ut beskriva processerna i svällande lermineral är ännu inte helt klarlagt. Förståelsen är emellertid tillräckligt god för att genomföra tillförlitliga modellberäkningar i säkerhetsanalysen.

- A1) Transport av vatten i vätskefas, som drivs av en vattentrycksgradient, kan beskrivas med en utvecklad variant av Darcy's lag. De parametrar som styr processen är materialets hydrauliska konduktivitet  $K$  och skillnaden mellan porvattentrycket och porgastrycket  $u_w - u_a$ . Båda dessa kan beskrivas som funktioner av portalet  $e$ , vattenmättnadsgraden  $S_r$ , jonkoncentrationen i porvattnet  $i_c$  och temperaturen  $T$ . Porvattentrycket för omättade leror är även en funktion av bevättningshistorien, dvs om materialet genomgår bevätning eller uttorkning.

Drivkraften för vattenflödet i vätskefas är den porvattentrycksgradient som orsakas av skillnader i matris-sugpotential. Den hydrauliska konduktiviteten varierar starkt med mättnadsgraden.

- A3) Transport av vatten i vätskefas, som drivs av en jonkoncentrationsgradient, osmos. Betydelsefulla osmotisk effekter kan uppstå vid höga salthalter i grundvattnet och i samband med saltanrikning i bufferten.
- A4) Transport av vatten i vätskefas, som drivs av gravitationen. Gravimetriskt genererat flöde är sannolikt försumbart i buffertmaterial på grund av den låga hydrauliska konduktiviteten. Däremot kan det påverka flödet i återfyllningen, jfr. process A1.
- A5) Transport av vatten i vätskefas, som drivs av en densitetsgradient i vattnet. Skillnader i densitet hos vattnet kan orsakas av t. ex. skillnad i temperatur eller salthalt. Densitetsgenererat flöde är sannolikt försumbar i buffertmaterial, jfr. process A1.
- B1) Transport av vatten i ångfas, som drivs av en ångtrycksgradient. Ångtrycket  $u_v$  i den del av porerna som är luftfyllda eller relativa luftfuktigheten ( $RH = u_v / u_{v0}$  där  $u_{v0}$  är mättnadsstrycket i luften) står i jämvikt med sugpotentialen i vätskefasen. Om RH är högre än jämviktssambandet kondenserar vattenånga och ökar vätskemängden som i sin tur minskar sugpotentialen tills jämvikt uppstår. Om sugpotentialen i olika delar av en jord är olika, t ex på grund av olika vattenkvot, medför detta att ångtrycket blir olika och att transport av vattenånga i den ofyllda delen av porerna sker med ångtryckskillnaden som drivkraft. På detta sätt transporteras alltså vatten i ångfas från ett ställe med lägre sugpotential till ett ställe med högre porundertryck. Emellertid är denna transport parallell med process A1 som ju sker i vätskefas. Förhållandet mellan dessa transportmekanismer är inte helt utredd.
- B2) Transport av vatten i ångfas, som drivs av en temperaturgradient, synes vara den viktigaste processen för ångtransport. Denna process kan också betraktas som en del av process B1. En temperaturskillnad åstadkommer en ångtrycksskillnad som transporterar ånga från en varmare del till en kallare. Den kan också modelleras som en diffusionsprocess driven av en temperaturskillnad /Philip och de Vries, 1957/.

Ångtransporten orsakar en vattenkvotsskillnad och därmed en skillnad i sugpotential, vilken i sin tur medför en transport i vätskefas i motsatt riktning. I ett slutet system, med konstant vatteninnehåll, uppstår efter en tid en jämviktssituation där ångtransporten är lika stor som vätsketransporten i alla delar. Ett konstant tillstånd uppstår med vattenkvotsskillnader som avspeglar temperaturskillnaderna i systemet.

- B3) Transport av vatten i ångfas, som drivs av en osmotisk gradient.



B4 och B5) Transport av vatten i ångfas, som drivs av gravitationen eller en densitetsgradient. Dessa processer är förmodligen obetydliga i buffertens porsystem, men kan vara av stor betydelse i spalter, särskilt i den vertikala spalten som kan finnas mellan kapsel och bentonit.

C1 och C2) Fasövergångar genom avdunstning och kondensation pågår ständigt i en temperaturgradient där avdunstningen i den varmare delen åtföljs av en kondensation i den kallare. Förutom att den kan medföra en värmetransport är den bara betydelsefull som avdunstning om bufferten inte isoleras från atmosfären. Det kan inträffa om ett mycket torrt deponeringshållet får stå öppet mot tunneln under lång tid eller om återfyllningen är torr.

D1 och D2) Termisk expansion av vatten i vätske- och ångfas kan indirekt påverka flödet antingen genom att vattentrycket ändras eller att densiteten ändras (konvektion). Övriga konsekvenser behandlas under mekaniska processer.

E1) Kompression av vatten i vätskefas har liten betydelse för väsketransportprocesserna annat än för ett vattenmättat system där tryckuppbyggnadens storlek vid en temperaturförhöjning är beroende av vattnets kompressibilitet.

E2) Kompression av luft kan vara en betydelsefull faktor i vattenmättnadsprocessen (Boyle's lag). Om luften stängs inne måste den komprimeras och gå i lösning i vattnet för att vattenmättnad ska uppnås. I högkompakterad bentonit synes sugpotentialen vara tillräckligt hög för att detta ska inträffa och full vattenmättnad uppnås utan något yttre vattentryck. Högkompakterad ren bentonit förmår alltså själv åstadkomma vattenmättnad. Återfyllningen har emellertid så låg sugpotential att en trycksatt luftvolym blir kvar om luften inte kan sippra ut. Den försvinner till största delen när fullt vattentryck utbildats.

F1) Transport av löst luft i vatten. När instängd luft komprimeras under vattenmättnadsfasen löses en volymsandel i vattnet. Denna löslighet (Henry's lag) är ungefär 2 procent vid lufttemperatur men sjunker kraftigt med ökad temperatur. För att ytterligare luft ska kunna lösas måste den lösta luften transporteras bort, vilket sker med diffusion.

**Inverkan av salthalt på bevätningstakten:** Hög salthalt hos grundvattnet som tas upp från närfältberget gör att svällningen hos bentonitkornen begränsas och lämnar initialt relativt vida passager för inträngning av vatten. Detta har fördelen att mättnad av bufferten kan ske snabbare än om saltfattigt vatten tas upp.

Salthalten i grundvattnet påverkar ångtrycksrelationen och därigenom vattenmättnadsförloppet. För typiska svenska grundvattenförhållanden är effekten liten i bufferten, men påverkan av salt grundvatten har avgörande betydelse för vattenupptaget i återfyllningen.

### **Modellstudier/experimentella studier**

En preliminär materialmodell som innehåller omättat vattenflöde finns framtagen /Börgesson och Johannesson, 1995/ och utvecklas. Beräkningarna görs med finita element metoden med programmet ABAQUS. Vissa generella delar av modellen finns beskriven i manualen /Hibbitt et al/ medan andra delar är specialgjorda för SKB /Börgesson och Johannesson, 1995/. Modellen innehåller processerna A1, A4, A5, B2, D1 och E1 som är de mest betydelsefulla för bufferten. Den saknar däremot de processer som hanterar luft (förutom B2) vilka kan vara betydelsefulla för mättnadsprocessen i återfyllningen.

Modellerna har både kalibrerats och delvis verifierats med laboratorieförsök. Arbete med utvärdering av modeller för omättade buffertmaterial pågår inom tre internationella projekt (DECOVALEX, CATSIUS CLAY och VALUCLAY). Dessa innehåller beräkningsexempel och jämförelser med mätresultat för både laboratorieförsök och fältförsök. Se t ex Börgesson och Hernelind /1995/; Alonso och Alcoverro /1997/; Börgesson och Hernelind /1997/.

I Sverige gjordes tidigt det stora fältförsök BMT (Buffer Mass Test) i Stripa för att studera bland annat bevättningsprocessen. I detta försök installerades högkompakterad bentonit och värmare i sex simulerade deponeringshål i skala 1:2. Tunneln ovanför två av dessa hål återfylldes med sand-bentonitblandningar med 10 och 20 procent bentonit. Försöken bröts efter några år då buffert och återfyllning grävdes ut med detaljerad provtagning och vattenkvotsbestämning. Resultaten visade att bevätningen hade gått till nära vattenmättnad för tre av hålen, medan de övriga inte hade ökat sitt vatteninnehåll mer än marginellt. I de tre förstnämnda hålen var vattentillrinningen större än i de övriga. Å andra sidan lämnades spalten mot berget öppen i dessa tre hål, medan spalten i de tre "torra" hålen fylldes med bentonitpulver. Någon tendens till ojämn vattenupptagning från berget fanns inte. De tre våta hålen med tom spalt hade en hög jämn vattenkvot med en vattenmättnadsgrad högre än cirka 80 procent. De tre torra hålen med pulverfylld spalt var torra närmast värmaren och blöta närmast berget, på ett sätt som kan förväntas på grund av den omfördelningsprocess som sker vid en temperaturgradient.

**Växelverkan berg:** En nyckelfråga för mättnadsprocessen är samverkan mellan berg och buffert. Om vatten endast förs till bufferten i de vattenförande sprickorna och resten av vattnet måste gå genom bergmatrisen kan vattenmättnaden bli både ojämn och ta lång tid. Om det finns en permeabel störd zon som distribuerar vatten från sprickorna längs bergväggen blir bevätningen snabbare och jämnare.

Samverkan mellan berg och buffert påverkas i hög grad av bergmatrisens permeabilitet. Studier av deponeringshålväggar i bland annat finska försökshål antyder att det finns en störd zon närmast hålet med en hydraulisk konduktivitet som är en till två storleksordningar större än hos den ostörda bergmatrisen. Om avståndet mellan de vattenförande sprickorna är tillräckligt litet och vattentrycket i sprickorna tillräckligt stort kan vattnet fördelas utefter hålväggen i den takt som bufferten förmår ta upp vatten. Vattenupptagningen blir därmed lika jämn och snabb som om fritt vatten fanns tillgängligt i ett filter mot bergväggen. Om däremot avståndet mellan de vattenförande sprickorna är stort och vattentrycket lågt blir bara områden kring sprickorna försörjda med vatten. Detta medför att vattenupptagningen blir ojämn och fördröjd. I ytterlighetsfallet att inga vattenförande sprickor finns måste allt vatten transporteras genom bergmatrisen och upptagningshastigheten blir då så långsam att förhållandet i bufferten präglas av en omfördelning av det befintliga vattnet. Samverkan berg/buffert behöver verifieras med ytterligare tester och beräkningar.

Återfyllningen i BMT var vid brytningen höggradigt vattenmättad i den yttre 1–1,5 m zonen, medan den inre delen var relativt opåverkad. Den jämna bevätningen tyder på att den störda zonen var tillräckligt permeabel för att kunna fördela vattnet jämnt över bergytan men kan även bero på att vattnet har kunnat strömma i återfyllningen eller i kontaktytan återfyllning/berg.

### **Tidsperspektiv**

Ovanstående analys visar att tiden till full vattenmättnad av bufferten kan variera stort beroende på framför allt växelverkan med omgivande berg. Om allt samverkar så att berget fördelar vattnet efter buffertens behov kan mättnad ha uppnåtts inom 10–15 år. Om inga sprickor finns utan allt vatten måste tas via bergmatrisen kan det ta mer än 100 år.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Förståelse: Förståelsen av processen är tillräcklig för säkerhetsanalysens behov.

Data: Den största osäkerheten/variabiliteten gäller de hydrauliska förhållandena i när-fältsberget.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Det finns modeller tillgängliga för att beskriva mättnadsförloppet i bufferten (se avsnitt modellstudier). Randvillkoret, dvs tillgången på vatten vid den yttre buffertranden är avgörande för bevätningstakten. Beräkningar genomförs därför för flera situationer t ex:

- Fri tillgång på vatten vid randen.
- Tätt berg – vatten tas genom bergmatrisen.
- Vattenupptag från deponeringstunnel.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

## **4.5.2 Vattentransport vid mättade förhållanden**

### **Överblick**

Vattentransport i mättad buffert är ett komplext samspel mellan en rad delprocesser i mikroskopisk skala. På en makroskopisk nivå är resultatet att vattengenomsläppligheten för en mättad buffert är mycket låg och detta är också det väsentliga resultatet för säkerhetsanalysen. Ovanstående gäller också återfyllningen men här är genomsläppligheten högre.

### **Allmän beskrivning**

Vattenflöde i mättad buffert och återfyllning är ett specialfall av omättat flöde. De processer som är involverade är samma som för omättade förhållanden men kan variera kraftigt i betydelse jämfört med omättade förhållanden.

Den viktigaste delmekanismen vid mättade förhållanden är transport av vatten i vätskefas, som drivs av en vattentrycksgradient. Förloppet kan beskrivas av Darcy's lag. Eventuella avvikelser från Darcy's lag, som kan förekomma vid låga gradienter, är till fördel genom att de leder till en minskad genomströmningshastighet. Hydrauliska konduktiviteten  $K$  är en funktion av framförallt buffertens och återfyllningens sammansättning, porret  $e$ , jonkoncentrationen i porvattnet  $i_c$  och temperaturen  $T$ .

**Inverkan av densitet, temperatur och salthalt för buffert:** För bufferten är  $K = 5 \cdot 10^{-14} - 5 \cdot 10^{-13}$  m/s vid de aktuella densiteterna. Omvandlingar till andra mineral med minskad montmorillonithalt som följd medför i allmänhet en högre hydraulisk konduktivitet. Tillåtna gränser för densitetsavvikelser /Bäckblom, 1996/ ger en ungefärlig skillnad i hydraulisk konduktivitet med en faktor 10. Temperaturen påverkar konduktiviteten genom förändring av vattnets viskositet, vilket innebär en ungefärlig ökning av konduktiviteten med en faktor 3 vid en temperaturökning från 20°C till 90°C. En ökning av salthalten till 6,1 M NaCl (mättad lösning) innebär en ungefärlig ökning av konduktiviteten med en faktor 10.

**Inverkan av densitet och salthalt för återfyllningen:** För återfyllningen är beroendet av densitet och jonkoncentration större, beroende på att bentonitdensiteten i ballastens porsystem är låg. För återfyllning med 15 procent bentonitinblandning är  $K = 10^{-10} - 10^{-9}$  m/s vid sött grundvatten och de densiteter som förväntas uppnås efter vattenmättnad. Inverkan av jonkoncentrationen är stor. En ökning av salthalten till 1,2 procent (Äspöförhållanden) medför en ökning av  $K$  med en faktor 10–100. För att nå samma hydrauliska konduktivitet måste då bentonitnehållet ökas till 30 procent. Andra faktorer som inverkar är packningsteknik och blandningsteknik. Dessa påverkar dels den mikrostrukturella homogeniteten genom bentonitfasens densitetsfördelning i ballastporerna, dels den makrostrukturella homogeniteten genom lägre densitet i taket på grund av packningsproblem. Sammanfattningsvis kan den erforderliga hydrauliska konduktiviteten (högst den hos det omgivande berget) uppnås med lämplig teknik och lämpligt materialval.

I sammanfattning kan följande sägas om vattenflöde i mättad buffert respektive återfyllning:

**Buffert:** Vattengenomsläppligheten hos bufferten är efter fullständig vattenmättnad ca  $10^{-13}$  m/s vid genomströmning med saltfattigt vatten. Villkoret för att transport genom strömning ska vara mera betydelsefull än diffusiv transport ges av:  $D_e / \Delta L < K_i$ , där  $D_e$  = effektiva diffusiviteten,  $\Delta L$  = transportlängden (endimensionell),  $K$  = hydrauliska konduktiviteten och  $i$  = hydrauliska gradienten. För stadiet efter återställande av den hydrauliska situationen i förvaret kan man sätta  $i = 10^{-2}$  och, för anjoner,  $D_e = 10^{-12}$  m<sup>2</sup>/s, vilket för bufferttjockleken  $\Delta L = 0,35$  m förutsätter att  $K$  överskrider  $3 \cdot 10^{-10}$ . Detta är minst två storleksordningar högre än buffertens verkliga konduktivitet. För katjoner är marginalen betydligt större. Slutsatsen är således att det enda betydelsefulla transportsättet för såväl vatten som lösta specier genom bufferten är diffusion. Diffusiv transport behandlas i avsnitt 4.7.3.

**Återfyllning:** Vattengenomsläppligheten hos återfyllningen efter vattenmättnad bestäms av montmorillonitnehåll, porvattenkemin och densiteten. Till skillnad från bufferten kan återfyllningen inte bli höggradigt homogen, dels beroende på att blandningsförfarandet inte ger jämn fördelning av komponenterna bentonit och bergkross, dels för att utläggning och packning inte kan göras lika effektiv över återfyllningens hela tvärsnitt och längd /Gunnarsson et al, 1996; Pusch, 1985b/.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Flöde i vattenmättad buffert och återfyllning har bara studerats i laboratorieskala i form av permeabilitetsförsök och svällnings/kompressionsförsök i ödometrar /Börgesson et al, 1995; Johannesson et al, 1998/.

### **Tidsperspektiv**

Den hydrauliska gradienten efter det att vattenmättnad och jämvikt i porvattentryck uppnåtts kring ett djupförvar förväntas bli låg. En enkel uppskattning kan göras av tiden tills hela vattenmängden i bufferten byts ut. Om gradienten sätts till 0,01, hydrauliska konduktiviteten till  $K = 10^{-13}$  m/s och tvärsnittsarean till  $10 \text{ m}^2$  tar det med Darcy's lag 15 miljoner år att omsätta de cirka  $5 \text{ m}^3$  vatten som finns i bufferten.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

En osäkerhet finns om Darcy's lag gäller vid de låga gradienter som förväntas uppkomma eftersom alla laboratorieförsök görs vid mycket höga gradienter. Alla mätta avvikelser visar emellertid att flödet är lägre än vad som förväntas av Darcy's lag.

Andra osäkerheter är effekten av omvandlingar, som förväntas ge högre hydraulisk konduktivitet. Även effekterna av mycket höga salthalter är otillräckligt utredda.

För bentonitblandad återfyllning finns ett antal osäkerheter. Egenskaperna är mätta direkt efter blandning. Risken för och effekten av eventuell homogenisering av bentonitdensiteten i ballastporerna är inte kända. De uppmätta hydrauliska konduktiviteterna förutsätter att inga kanaler eller glipor finns.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

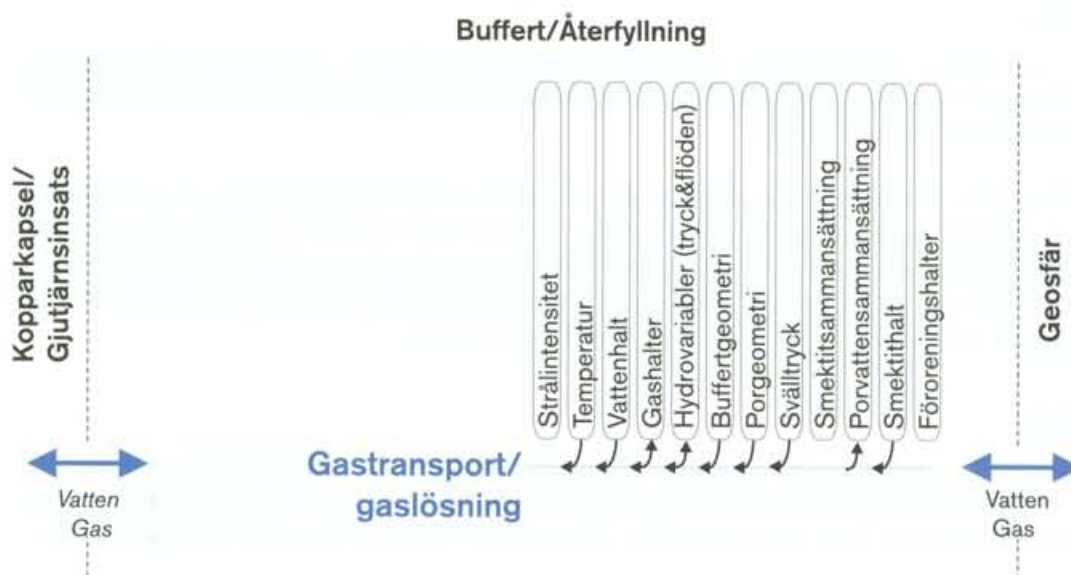
**Basscenario:** I basscenariot ska visas att de processer som kan påverka buffertens diffusivitet och konduktivitet hela tiden håller sig inom de ramar som gör att diffusion kommer att dominera över advektion i den mättade bufferten.

**Kapseldefektscenario:** I kapseldefektscenariot förutsätts att ingen advektion förekommer i den mättade bufferten. I återfyllningen är det dock möjligt att transport med advektion och diffusion kan vara av liknande storleksordningar och effekten kommer att utredas.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

### 4.5.3 Gastransport/gaslösning



Figur 4-6. Gastransport/gaslösning.

#### Överblick

Transport av gas i bufferten kan bli aktuellt i två skeden i förvarets utveckling:

- När förvaret försluts kommer luft att vara inestängd i bufferten. När bufferten mättas med vatten måste luften ta sig ut.
- Om en kapsel skulle få en genomgående defekt och vatten tränger igenom kopparkapseln förväntas gjutjärnsinsatsen korrodera och frigöra väte. Om mer väte produceras än vad som kan lösas i vattnet i kapseln kommer en gasfas att bildas.

Gas som är inestängd i eller av buffert och återfyllning kan ta sig ut på två sätt:

- Om produktionshastigheten är låg eller gasmängden liten kan gasen lösas i porvattnet och transporteras ut med diffusion.
- Om produktionshastigheten är hög eller gasmängden stor bildas en gasfas, trycket stiger och vid ett kritiskt tryck bildas en flödesväg genom bufferten.

#### Allmän beskrivning

**Vattenmättnadsskedet:** Gasomsättning i samband med bevätningen av buffert och återfyllning redovisas i avsnitt 4.5.1. Under dessa förhållanden förväntas all gas lösas i buffertens porvatten och transporteras ut med diffusion.

**Gastransport från trasig kapsel innan mättnad:** Innan bufferten är mättad förväntas vatten endast kunna ta sig in i kapseln via diffusion i ångfas. Vätgasproduktionen från korrosion kommer därför att vara begränsad och den bildade gasen förväntas kunna lämna bufferten. Gastransportmotståndet i en omättad buffert är också avsevärt lägre än i en mättad.

## Gas från trasig kapsel efter mätnad:

### Diffusion

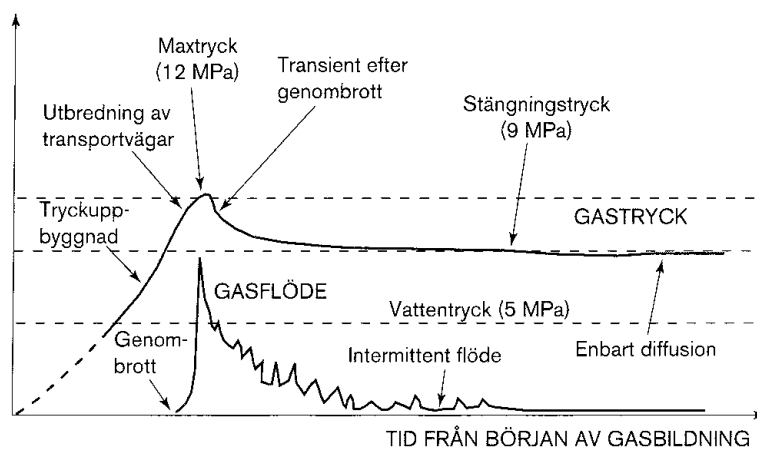
Vätgas som bildas vid korrosion av gjutjärnsinsatsen kan lösas i porvattnet och transporteras bort från kapseln med diffusion. Den maximala transportkapaciteten har beräknats av Wikramaratna et al /1993/.

Resultaten från beräkningarna visar att den diffusiva transportkapaciteten är avsevärt lägre än vätgasproduktionen från korrosion, om man antar att hela gjutjärnsinsatsens yta är tillgänglig för korrosion och vattentillförseln inte är begränsande för korrosionen, se även avsnitt 3.7.1. Under sådana förhållanden är det troligt att en gasfas bildas inuti kapseln och att gasen måste ta sig ut genom flöde i gasfas.

### Gasflöde

Figur 4-7 visar gastrycksuppbyggnad i och gasflöde genom en mättad buffert. I ett första skede efter en genomgående kapselskada förväntas vatten tränga in i kapseln med påföljande korrosion med vätgasbildning. Gastrycket i kapseln kommer därigenom att stiga.

Följande bild av det fortsatta förloppet är en tolkning av genomförda teoretiska och experimentella studier: Vid ett kritiskt tryck (öppningstryck) förväntas bufferten släppa igenom gasen. Ett flertal experiment har visat att bentonit /Pusch et al, 1985b; Horseman och Harrington, 1997; Tanai et al, 1997/ inte släpper igenom gas förrän trycket överstiger summan av svälltrycket och vattentrycket. När trycket når detta värde bildas en transportväg genom bufferten och gas frigörs. Trycket sjunker och om gasproduktionen är tillräckligt låg förväntas transportvägen stängas. Detta sker vid ett s k stängningstryck, som beror av svälltrycket. Vid tryck lägre än stängningstrycket transporteras gas enbart med diffusion, se figur 4-7. Laboratorieförsöken har visat att också stängningstrycket är beroende av sväll- och vattentryck, men är betydligt lägre än summan av dessa – för ett sammanlagt svälltryck och vattentryck på 12 MPa är stängningstrycket 9 MPa. Denna skillnad gör att gasen förväntas transporteras ut med ett kontinuerligt flöde tills trycket inuti kapseln sjunker till stängningstryck. Då gasen strömmar ut ur kapseln kommer vatten att ha mycket svårt att komma in, vilket medför att korrosionen och gasproduktionen sjunker så att trycket förr eller senare når stängningstrycket. Trycket inuti kapseln förväntas då öka igen och efter en tid kan transportvägen åter öppnas.



Figur 4-7. Tidsförloppet vid gastransport genom bentonit /SKB, FUD-program 98/.



Om den gas som fanns kvar instängd i bufferten efter den första genomtransporten har hunnit lösa sig i porvattnet och transporterats bort förväntas öppningstrycket för den andra gascykeln vara identiskt med det för den första. Om det däremot finns gas kvar i bufferten förväntas den andra öppningen vid ett lägre tryck. Det är inte helt klarlagt hur den bildade transportvägen kommer att se ut, men det är troligt att gasen bildar ett system av små flödeskanaler /Nash et al, 1998/. Bufferten kommer därför inte att torkas och det är helt klart att mängden vatten som gasen kan tränga ut ur bufferten är mycket liten. När gasen nått den borrhörda zonen i närfältberget är erforderligt tryck för att få den att tränga vidare betydligt lägre än i bufferten. Det måste överskrida summan av vattentrycket och kapillärspänningarna i störzonens finsprickor eller i kanaler i sprickor som skär deponeringshålen, vilket tillsammans ger ett tryck av 5-10 MPa.

Energien som driver gastransporten kommer från kompression av gasen inuti kapseln och är proportionell mot den tillgängliga gasvolymen. Om man antar att volymen är en halv kubikmeter och gastrycket sjunker från 12 till 9 MPa kommer 15 MJ att frigöras när transportvägen bildas. I ett system med innesluten lera (deponeringshål) kommer förmodligen gasen att frigöras kontrollerat, dvs den kommer inte att kunna slita med sig buffertmaterialet, men experiment under öppna förhållanden, dvs utan omgivande mottryck, visar att gasgenombrott kan vara en våldsamt process /Donohew et al, 1998/.

De experimentella resultat som finns tillgängliga visar att gas kan ta sig igenom en högkompakterad buffert utan att äventyra den fortsatta funktionen hos de tekniska barriärerna. Inget experiment med en gasvolym som motsvarar volymen i kapselns hålrum (cirka 1 m<sup>3</sup>) har dock genomförts och det är därför inte helt klart vilken effekt frigörelsen av stora gasmängder har för förvarets funktion.

### **Modellstudier/experimentella studier**

**Gaslösning:** Inga specifika studier har genomförts med syfte att studera hur gas löses i bentonitens porvatten. Erfarenheten från vattenmättnadsförsök visar emellertid att högkompakterad bentonit normalt vattenmättas helt och att innesluten gas inte kvarstår. Den mekanistiska tolkningen är att bentonitens svälltryck komprimerar innesluten gas som löses i porvattnet och transporteras ut genom diffusion.

**Gastransport:** Gastransportprocesser har studerats i kontrollerade flödesexperiment i Boomlera och MX-80 bentonit /Harrington och Horseman, 1997/. Gastrycket som funktion av tid från dessa experiment är mycket lika de från respons från hydrauliskt inducerade sprickor i leran /Murdoch, 1993/. Detaljer i resultaten antyder kanalbildning och propagering, vilket indikerar att gasen rör sig i ett nätverk av mikrokanaler skapade av dragbrott på leran under det höga gastrycket. Om kanaler inte bildades skulle leran sannolikt vara tät för gas /Harrington och Horseman, 1997/. När gasinjektionerna stoppades i försöken sjönk trycket spontant och antog efter en tid ett lägsta värde, stängningstryck. Detta tryck är beroende av lerans svälltryck och låg på ungefär 4 MPa över vattentrycket för MX-80 med en torr densitet av 1,55 ton/m<sup>3</sup>. Stängningstryck kan tolkas som det lägsta värdet på gasövertryck som kan upprätthålla ett kontinuerligt gasnätverk genom bentoniten.

Vid repeterade gasinjektionscykler i laboratorieförsök sjunker genombrottstrycket jämfört med det första genombrottet, vilket visar att transportvägarna inte försvinner helt under experimentella tidsskalor. Gasfyllda hålrum finns kvar i transportvägarna. Ett experiment med Boomlera har dock visat att det ursprungliga genombrottstrycket kan återfås genom att genomströmma porerna i leran med vatten /Harrington och Horseman, 1997/, vilket antyder att transportvägarna sluts när gasen i hålrummen försvinner. Under förvarsförhållanden kommer lösning och diffusion att vara den dominerande transportmekanismen för den kvarvarande gasen i hålrummen.

## **Tidsperspektiv**

Gastransport kan förekomma då vatten står i kontakt med gjutjärnsinsatsen i en skadad kapsel.

## **Naturliga analogier**

Tissot och Pelet /1971/ skriver om olje- och gasrörelser i lerskiffer: "Avlägsnandet av olja eller gas från en finstrukturerad lermatris går emot de kapillära lagarna och är i sin princip omöjlig. Barriären kan dock brytas på ett sätt. Trycket i fluiderna som bildas i porerna i leran ökar då kerogenen bildas. Då detta tryck överskrider den mekaniska hållfastheten hos leran, kommer mikrokanaler att bildas, som är storleksordningar större än de naturliga porerna och kommer därigenom att släppa ut en olje- eller gasfas, fram till det att trycket sjunker under ett tröskelvärde och sprickorna kan fyllas igen och en ny cykel startar". Dessa observationer påminner om slutsatserna från gastransport-experimenten i bentonit.

## **Sammanfattning av osäkerheter**

**Gaslösning:** Effekten av minskad gaslöslighet i buffertens porvatten som följd av förhöjd temperatur är beräkningsbar, men experimentella studier har inte genomförts. Vid atmosfärstryck är lösligheten mycket låg vid buffertens maxtemperatur. För återfyllningen spelar grundvattentrycket en avgörande roll för lösligheten hos innesluten gas eftersom endast små svälltryck utbildas. Vattenmättnadsförloppet i återfyllningsmaterialet är således kopplat till återupprättandet av det hydrostatiska trycket och därmed svårt att förutsäga med dagens kunskapsläge.

**Gastransport:** En kvarstående osäkerhet i förståelsen av gastransport i buffertmaterialet gäller antalet, storleken och det rumsliga arrangemanget av de gasförande sprickorna och volymbeteendet hos leran under gasinjektion. De experiment som gjorts hittills indikerar att leran måste utvidgas (växa i volym) under gastransporten och att förändringar i gasinnehåll måste balanseras med en ökad totalvolym /Harrington och Horseman, 1999/.

Detta tolkas som att gasen bildar ett spricknätverk genom leran och traditionella tvåfasflödesmodeller för porösa medier, där gasen tränger undan porvattnet är inte tillämpbara. Eftersom leran utvidgas då gasen bildar ett nätverk blir randvillkoren i experimenten mycket viktiga. Det är inte säkert att beteendet blir detsamma för ett experiment där bentonitprovet utsätts för ett konstant yttre tryck (motsvarande det hydrostatiska trycket i förvaret), som för ett experiment där provet är instängt i en konstant volym (motsvarar deponeringshålets väggar). Preliminära resultat från experiment genomförda under denna rapportens produktion har bekräftat att genombrottstrycket blir högre för ett prov med konstant volym än för ett med konstant yttre tryck. Detta är konsistent med modellen av uppbyggnaden av ett spricknätverk. Dessa experimentella observationer är inte triviala att extrapolera till ett verkligt förvar. Deponeringshålet har visserligen konstant volym, men mängden buffert i hålet gör att en kompression av bufferten skulle kunna gå lättare än i ett laboratorieexperiment i 5 centimeterskala, eftersom gaskanalens tvärsnittsytta inte behöver vara större i ett verkligt fall än i experimentet.

En annan osäkerhet är stängningstrycket – det finns idag ingen modell för hur stängningstryck beror på svälltryck – all kunskap om stängningstryck grundar sig på ett fåtal experimentella observationer. Extrapolationen av experimentella observationer till ett förvar i full skala har inte testats, eftersom inga fullskaleexperiment någonsin genomförts.

## Hantering i säkerhetsanalysen

**Basscenario:** Se vattentransport vid omättade förhållanden. Gasmängden i ett deponeringshål är cirka 6 volymprocent vid atmosfärstryck. När det hydrostatiska trycket har byggts upp kommer gasvolymen att ha minskat med en faktor 50. Denna lilla mängd kommer snabbt att lösa sig i porvattnet och kan försummas i vattenmättnadsberäkningarna.

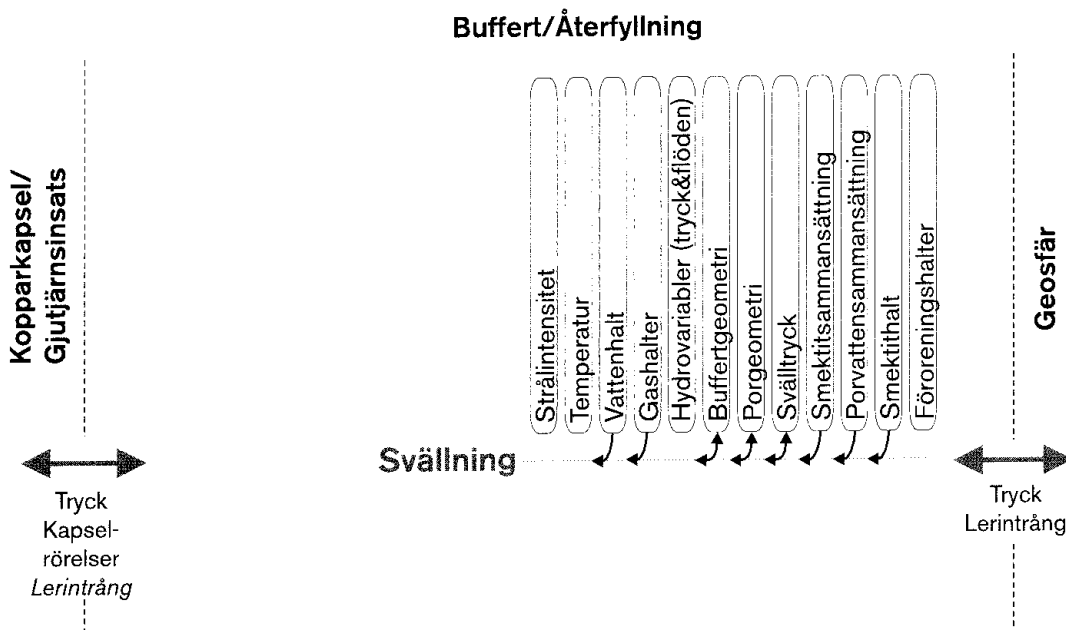
**Kapseldefektsscenario:** Redovisning av modell- och experimentella studier av gasuppbbyggnad och transport i samband med modelleringen av korrosionen av gjutjärnsinsatsen och vattentransporten i kapseln.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador, se kapseldefektsscenario, annars basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador, se kapseldefektsscenario, annars basscenariot.

## 4.6 Mekaniska processer

### 4.6.1 Svällning



Figur 4-8. Svällning.

### Överblick

Vatten tas upp av omättad bentonit och orsakar svällning. Om bentoniten inte kan expandera fritt utbildas ett svälltryck som når sitt maximala värde vid full vattenmättnad.

Svällningen leder till sammanpressning av återfyllningen ovanför deponeringshålen, ett mekaniskt tryck mot kapsel och deponeringshålets kanter och till lerinträngning i sprickor kring deponeringshålet. Beroende på förhållandena i närberget kan leran i sprickorna tänkas föras bort med grundvattnet och ny lera tränga in, vilket skulle kunna ge en successiv erosion av bufferten, se avsnitt 4.7.7. Förutom dessa mekaniska effekter förändras buffertens vattenledningsförmåga och diffusionsegenskaper av svällningen.

### **Allmän beskrivning**

Bufferten har formen av en cylindrisk stapel av block av högkompakterat bentonitpulver som omges av en spalt med fyllning av bentonitpellets. I bevätningsskedet byggs interlamellära hydratskikt upp av vatten som transporteras in. "Stackarna" av montmorillonitflak sväller och motstånd mot svällning genom begränsning av svällningsvolymen manifesteras av att ett svälltryck utbildas.

Följande beskrivning belyser principerna för modellering av svällning ur geotekniskt perspektiv och avser inte de bakomliggande mekanismerna.

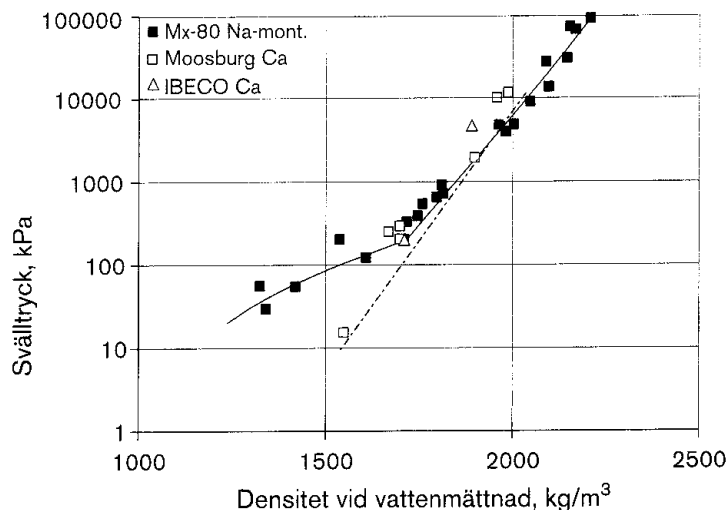
Svällningen kan tänkas bero på en repellerande kraft mellan montmorillonitflaken. Om begränsad tillgång till vatten finns i ett fritt prov motverkas svällningen av ett undertryck i porvattnet. Om ett prov är vattenmättat, dvs alla porer är fyllda med vatten, motverkas svällningen av ett undertryck i porvattnet utbildas i vattenmeniskerna på provets yta. Porundertrycket är lika stort som det inre svälltrycket om inget yttre tryck appliceras. Om provet är omättat, utbildas vattenmeniskerna även inuti provet. Undertrycket i porvattnet är i huvudsak en funktion av vattenkvoten i provet dvs mängden vatten per viktenhet torrt material. Detta undertryck kallas sugpotential. När vatten tillförs ett fritt prov ökar vattenkvoten, repulsionskrafterna och sugpotentialen minskar, vilket medför att provet sväller tills ett nytt jämviktsläge med lägre inre svälltryck nås. Om volymen hålls konstant överförs istället en del av det inre svälltrycket till ett yttre svälltryck, som kan mätas. När ett prov med konstant volym är helt vattenmättat och porvattentrycket hålls positivt blir hela svälltrycket till ett yttre tryck. Vid vattenmättnad är svälltrycket och porvattentrycket oberoende storheter och ger ett totaltryck som är summan av trycken. I princip gäller det även innan full vattenmättnad nås men eftersom inte alla porer är fyllda med vatten verkar krafterna inte på hela provet och trycken är inte enkelt adderbara.

Svälltryckets beroende av de variabler som räknas upp nedan kan förklaras med en ändring av de resulterande repellerande krafterna mellan montmorillonitflaken.

De variabler som påverkar svällning eller krympning och det genererade svälltrycket hos bufferten är:

1. densiteten,
2. montmorillonithalten,
3. adsorberat katjonslag (montmorillonitsammansättningen),
4. grad av cementering,
5. porvattnets sammansättning,
6. vattenmättnadsgraden.

Inverkan av dessa faktorer på svällförmågan behandlas kort i detta kapitel. Faktorerna 2–5 behandlas under kemiska processer, avsnitt 4.7.



**Figur 4-9.** Svälltryckets beroende av densitet och adsorberat jonslag (omarbetad efter Börger-son et al /1995/).

**Inverkan av densitet:** Densiteten vid vattenmättnad är avgörande för vattenkvoten och därmed för antalet interlamellära vattenmolekylskikt, som i sin tur bestämmer svällpotentialen och svälltrycket. Figur 4-9 illustrerar skillnaden i svälltryck vid olika densiteter.

**Inverkan av montmorillonithalten och typen av smektit samt slag av adsorberad katjon:** Enligt figur 4-9 är svälltrycket relativt oberoende av det adsorberade jonslaget om densiteten överskrider ca 1800 kg/m<sup>3</sup> i vattenmättat tillstånd och montmorillonithalten är densamma. Vid lägre densiteter är svälltrycket lägre om det adsorberade jonslaget är Ca eller någon annan flervärd katjon (t ex Cu och Fe). Tabell 4-2 ger en bild av svälltryckets beroende av smektithalt och smektittyp. Data ges för ett antal kommersiella bentoniter med olika smektithalt och för blandningar av Na-bentonit och sandballast. Dessa värden kan anses representera förväntade effekter av omvandlingar av natriumbentonit. En minskad smektithalt kan tänkas motsvara en inblandning av överksam ballast. En omvandling av Na-bentonit till Ca-bentonit, som sker genom ett jonbyte, förväntas ge svälltryck som motsvarar de angivna för Ca-bentonit. Destillerat vatten utnyttjades för mättnad av de undersökta lermaterialen.

**Tabell 4-2. Exempel på svälltryck i MPa som funktion av smektithalt och densitet /Pusch, 1995a/.**

Bentonit	Smektithalt (procent)	Densitet vid mättnad, kg/m <sup>3</sup>	
		1800	2000
MX-80	75	1,2	8,7
IBECO Na	70	0,6	7,3
IBECO Ca	80	0,2	4,7
Kunigel	40	0,2	1,0
Beidellit	35	1,5	4,2
Saponit	70	2,5	8,8
30/70 MX-80/sand	20	0	0,5
50/50 MX-80/sand	40	0,2	2,0

**Inverkan av cementeringsgrad:** Naturliga bentoniter, som undergått cementering genom utfällning av kisel och aluminiumföreningar i samband med värmepåverkan, uppvisar låga svälltryck och dålig svällbarhet trots ett betydande innehåll av montmorillonit/beidellit /Müller-Vonmoos et al, 1990; Pusch, 1983b/.

**Inverkan av porvattnets kemiska sammansättning:** Om porvattnet i bentoniten innehåller salt, vilket kan vara följden av antingen att bentoniten vattenmättats med salthaltigt grundvatten eller att salt diffunderat in i porvattnet efter vattenmättnad, påverkas svälltryck och svällförmåga /Karnland, 1997a/. Svälltrycket minskar med ökande salthalt. Minskningen är relativt sett störst vid låga densiteter.

**Inverkan av vattenmättnadsgraden:** I omättat tillstånd krymper bentonit/vatten-systemet vid torkning och expanderar vid bevätning. Volymförändringen vid vattenupptag hos t ex ett block är mindre vid omättat tillstånd eftersom svällningen delvis sker i tidigare ofyllda porer. Krympning på grund av uttorkning förväntas ske nära kapseln, vilket kan medföra uppsprickning av bufferten.

**Betydelse av svällning/krympning för buffertens allmänna funktion:** Svällning eller krympning hos bufferten ger ändring av densiteten vilket har betydelse för dess funktion när det gäller vatten-, jon- och kolloidtransport, gastransport och mekanisk verkan:

1. Påverkan på den hydrauliska konduktiviteten. En sänkning av densiteten på grund av svällning i deponeringshål ökar den hydrauliska konduktiviteten. Påverkan kan dock antagas vara liten under normala förhållanden.
2. Påverkan på den diffusiva jontransporten. Se 1.
3. Påverkan på svälltrycket som utövas mot kapsel, återfyllning och närfältberg. Svälltrycket minskar vid en densitetssänkning, vilket kan medföra ojämnt svälltryck mot kapseln. Påverkan kan dock antagas vara liten under normala förhållanden.
4. Påverkan på dess förmåga att bära kapseln. Bärförmågan minskar med minskad densitet. Påverkan kan antagas vara liten under normala förhållanden.

### **Modellstudier/experimentella studier**

**Mättad bentonit:** Bentonits svällningsförmåga och svälltryck vid vattenmättade förhållanden har studerats i detalj med laboratorieförsök /Börgesson et al, 1995/. Resultaten har använts till att göra en materialmodell som kan användas för FEM-beräkningar. Den baseras på effektivspänningsteorin och överensstämmer i grunddragen med modeller för andra jordarter fastän magnituden på svällning och tryck är avsevärt större för bentonit. För närvarande pågår försök med volymskrympning för att modellera de volymförändringar och svälltrycksförändringar som kan uppkomma under lång tid.

Materialmodellerna har använts till att göra beräkningar av olika utvecklingar som sammanhänger med volymsförändringar i ett förvar. Exempel på beräkningar är följande:

- Uppsvällning av buffert mot återfyllningen i deponeringshål /Pusch och Börgesson, 1992/.
- Sättningsförsöket i Stripa /Börgesson, 1993a/. Jämförelse av beräknade och uppmätta rörelser och densiteter vid belastning av kapsel i deponeringshål.
- Beräkning av kapselrörelser för utformning med två kapslar i ett deponeringshål /Börgesson, 1993b/.

**Omättad bentonit:** Ett fåtal försök har gjorts för att studera volymändringen som funktion av mättnadsgrad och portal. Dessa försök har använts för att kalibrera materialmodellen för omättad lera. Ytterligare försök behöver göras för att förbättra förståelsen och modellen.

### **Tidsperspektiv**

Vattenmättnadsfasen förväntas ta mellan 10 och 100 år beroende på bergets egenskaper. Under denna tidsrymd sker troligen även den del av expansionen som begränsas av konsolideringshastigheten (som styrs av den hydrauliska konduktiviteten). Volymskrympningen kan fortgå under tusentals år men bedöms inte vara av den storleksordningen att den avsevärt påverkar funktionen.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Vid vattenmättat tillstånd bedöms svällningsprocessen vara tillräckligt känd för att densitetsförändringar i bufferten ska kunna beräknas med tillräcklig noggrannhet. Den största osäkerheten uppkommer vid beräkning av svälltryckets storlek efter utsvällning där avvikelsen bedöms kunna vara  $\pm 30$  procent beroende på spridning i svälltrycksmätningar och osäkerheten i vissa materialparametrar. Viss validering har gjorts genom laboratorie- /Pusch och Adey, 1986/ och fältförsök /Börgesson, 1993a/ och fortsatt validering sker genom fältförsöken i Äspölaboratoriet.

På lång sikt kan svällningsegenskaperna förändras på grund av omvandlingar och cementering (se avsnitt 4.7.5 montmorillonitomvandling). De mekaniska konsekvenserna av omvandlingar kan antas ge egenskaper som är likvärdiga med egenskaperna för motsvarande "naturliga mineral". Kunskapen om vilka egenskaper dessa mineral har och vad som orsakar skillnaderna är begränsad.

Cementeringseffekter ger betydelsefulla förändringar hos buffertens fysikaliska egenskaper eftersom de kan ge ett material som är sprött och utan svällningsförmåga och således kan spricka och öppna kanaler och spalter i bufferten. De har ännu inte utretts fullständigt.

Den mekaniska funktionen hos ej vattenmättad bentonit är komplicerad att modellera och de modeller som finns idag är ofullständiga, speciellt vid modelleringen av volymförändring och svälltryck.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Hanteras tillsammans med vattenmättnad. Även långsiktiga förändringar behöver tas upp.

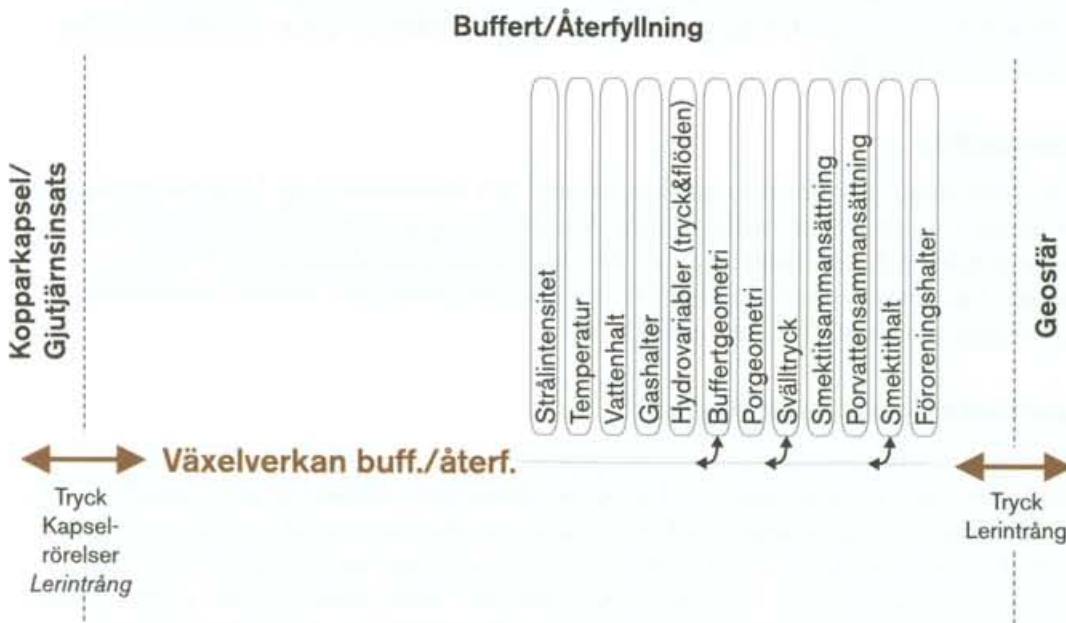
**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Påverkan av förändrad jonstyrka hos vattnet.

**Jordskalv:** Svälltryckets betydelse för buffertens förmåga att dämpa mekaniska påfrestningar från berg rörelser på kapseln behandlas i detta scenario.



## 4.6.2 Mekanisk växelverkan buffert/återfyllning



Figur 4-10. Mekanisk växelverkan buffert/återfyllning.

### Överblick och allmän beskrivning

I kontaktytan mellan bufferten och återfyllningen utövar bufferten ett svälltryck mot återfyllningen och *vice versa*. Eftersom skillnaden i svälltryck är stor uppstår ett netto-tryck mot återfyllningen varvid bufferten sväller och återfyllningen komprimeras. Vid denna process minskar svälltrycket från bufferten i takt med att densiteten sjunker. Samtidigt ökar mottrycket från återfyllningen eftersom den komprimeras och dess densitet ökar. Svällningen av bufferten och kompressionen av återfyllningen motverkas i viss mån av friktion mot berget. När kraften av svälltrycket i bufferten är lika stor som summan av kraften av mottrycket i återfyllningen och friktionen mot berget upphör processen eftersom jämvikt uppstått.

Uppsvällningens storlek beror på buffertens och återfyllningens ursprungliga densiteter och avhängiga expansions- och kompressionsegenskaper.

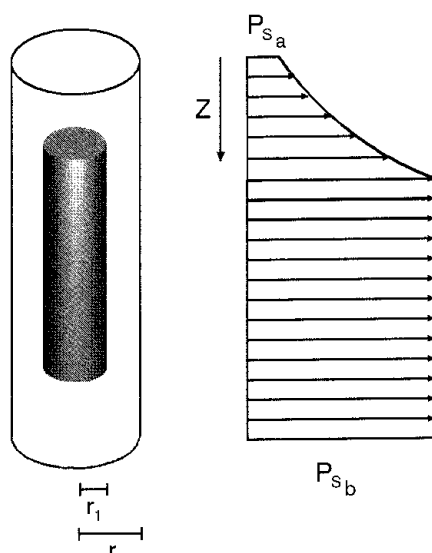
Homogeniseringen av bufferten blir på grund av friktionen mot berget och friktion i bufferten inte fullständig. Densitetsminskningen av svällningen minskar därför med ökat avstånd från kontaktytan. Vid normalt förväntad densitet hos återfyllningen sträcker sig troligen inte densitetsminskningen ner till kapseln som ligger 1,5 m under kontaktytan.

Figur 4-11 illustrerar resultatet av en förenklad jämviktsberäkning av buffertens svällning uppåt i deponeringshålen i samband med kompression av återfyllningen i deponeringstunnlarna /Pusch et al, 1985a/.

### Modellstudier/experimentella studier

Flera modellstudier har utförts med FEM-beräkningar med ABAQUS:

För PASS /Pusch och Börgesson, 1992/ har en beräkning av ett extremfall gjorts där bufferten antogs ha en densitet av 2,1 t/m<sup>3</sup> efter vattenmättnad och återfyllningens densitet antogs vara 1,9 t/m<sup>3</sup> efter vattenmättnad vilket motsvarar högre densitet hos



*Figur 4-11. Schematisk bild av det minskade svälltrycket i buffertens översta del som följd av expansionen uppåt.*

bufferten och lägre hos återfyllningen än vad som anges i referensfallet enligt Bäckblom /1996/. Detta gav en förskjutning uppåt av ca 30 cm.

I samband med studier om funktionen hos deponeringshål med två kapslar gjordes en beräkning av kapslarnas rörelser som inkluderade uppsvällning mot återfyllning /Börge-son, 1993b/. Vid denna beräkning antogs återfyllningen vara betydligt styvare med en densitet efter vattenmättnad på 2,2 t/m<sup>3</sup>. Den beräknade uppsvällningen blev ca 7 cm.

Erfarenheter från fältförsök i Stripa finns. I BMT (Buffer Mass Test) simulerades 6 deponeringshål i halv skala. Kontaktytans rörelse mättes med mynt som placerades i ytan och avvägdes före respektive efter försöken. Den uppmätta utsvällningen varierade mellan 4 och 7 cm beroende på testtid och vattenmättnadsgrad i bufferten.

### **Tidsperspektiv**

Tiden till jämvikt styrs av bevättningshastigheten, buffertens permeabilitet och svällningen storlek. Uppskattningsvis tar det mellan 10 och 100 år om krypeffekter försummas.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

**Förståelse:** Mekanismerna för denna samverkan är väl kända och delvis bekräftade i BMT.

**Data:** Osäkerheten består i val av parametervärden som i sin tur beror av den uppnådda densiteten hos återfyllningen.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Processen modelleras i basscenariot som en del av den hydraulisk/me-kaniska utvecklingen i buffert/återfyllning.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

### 4.6.3 Mekanisk växelverkan buffert/kapsel

#### **Överblick**

Mekanisk växelverkan buffert/kapsel uppkommer från bufferten genom lermatrisen som genererar både tryckpåkänningar och skjuvspänningar, genom porvattnet som bara genererar tryckpåkänningar och genom gas i bufferten som också bara genererar tryckpåkänningar. Förändringar i dessa tre faktorer sker under vattenmättnadsprocessen och kan även ske på grund av någon yttre påverkan. Kapselns tyngd påverkar bufferten, medan påverkan av buffertens tyngd på kapseln är försumbar.

#### **Allmän beskrivning**

Den mekaniska växelverkan mellan buffert och kapsel är av följande natur:

- Svälltryck och vattentryck utövas mot kapseln.
- Termiskt inducerat porvattentryck utövas mot kapseln.
- Innestängd gas i bufferten utövar tryck mot kapseln.
- Kapselkorrosionsprodukter ger tryck mot bufferten.
- Vertikalrörelse av kapsel i buffert.
- Överföring av skjuvspänningar från berg via buffert till kapsel, särskilt vid jordskalv.
- Inträngning av buffert i skadad kapsel.

#### **Svälltryck och vattentryck mot kapsel**

Svälltrycket utbildas parallellt med att bufferten undergår bevätning. Om bevätningen är jämn ökar svälltrycket lika mot kapselns periferi förutom mot ändytorna där bevätningen av bufferten tar längst tid på grund av att buffertjockleken är större. Om bevätningen är ojämn blir svälltryckuppbyggnaden mot kapseln ojämn. Vid olyckliga kombinationer av bevätningsområden kan kapseln utsättas för väsentliga påfrestningar som påminner om belastning av en balk som är fritt upplagd eller fast inspänd.

Vattentryck mot kapseln uppstår först när bentoniten är vattenmättad. Teoretiskt kan detta tryck också bli ojämnt om bufferten är mättad in till kapseln i vissa delar och omättad i andra delar.

Det totala svällnings- och vattentrycket blir efter full vattenmättnad och fullt vattentryck summan av dessa tryck.

#### **Termiskt inducerat porvattentryck mot kapseln**

Om bufferten är vattenmättad innan maximala temperaturen uppnåtts medför temperaturökningen att vattnet vill expandera men på grund av den begränsade volymen inte kan expandera. Istället fås en tryckökning som teoretiskt kan bli mycket stor. Emellertid medför en sådan portrycksökning att vattnet samtidigt dräneras ut genom berget. Här föreligger alltså en kamp i tiden mellan volymsutvidgningen hos vattnet och bortdräneringen. Preliminära beräkningar visar att något stort tryck inte hinner byggas upp /Pusch och Börgesson, 1992/.

### **Instängd gas i bufferten som utövar tryck mot kapseln**

Gas som genereras eller stängs in vid kapselytan medför ett tryck mot kapseln. Gastrycket begränsas emellertid till bentonitens öppningstryck (se avsnitt 4.5.3). Bentoniten släpper ifrån sig gas antingen genom att en tillfällig kanal bildas eller genom att gasen löses i vattnet och diffunderar ut.

### **Kapselkorrosionsprodukter som ger tryck mot bufferten**

Utvändig korrosion av kopparkapseln, som både kan vara lokal och global, ökar volymen eftersom korrosionsprodukterna har lägre densitet. Volymökningen av kapseln medför att bufferten konsolideras och trycket mellan buffert och kapsel ökar. Vid defekt kopparkapsel kan motsvarande effekt fås i gjutjärnet.

### **Vertikalrörelse av kapsel i buffert**

Förhållandet att kapseln har högre densitet än bufferten innebär i princip att den kommer att sjunka på samma sätt som ett husfundament sätter sig, dvs genom konsolidering och krypning. Kapselns rörelser är i praktiken komplexa därför att buffertens svällning uppåt i hålen inledningsvis dominerar och ger en hävning av kapseln genom att densiteten och svälltrycket ovanför kapseln minskar. Sättningen uppstår först efter buffertens vattenmättnad och expansion och består i huvudsak av mycket långsam krypning.

### **Överföring av skjuvspänningar från berg via buffert till kapsel**

Bergrörelser i form av skjuvning längs ett sprickplan påverkar kapseln via bufferten. Bufferten fungerar därvid som en dämpare av den skarpa och hårda bergkilen. Eftersom rörelsen inte förändrar den totala volymen hos bufferten blir effekten i huvudsak en formförändring varvid buffertens skjuvhållfasthet reglerar påverkan. Skjuvhållfastheten är ganska låg eftersom friktionsvinkeln vid buffertens densitet endast är cirka 10 grader /Börgesson, 1986/. Skjuvhållfastheten ökar emellertid snabbt med ökande densitet och fördubblas vid en ökning av densiteten med cirka 5 procent.

### **Inträngning av buffert i skadad kapsel**

Bentonit kan tränga in i en spricka i kapseln. Påverkan på bufferten är dock obetydlig i jämförelse med inträngning i bergsprickor (se avsnitt 4.7.7).

### **Modellstudier/experimentella studier**

#### **Svälltryck och vattentryck mot kapsel**

Svälltryck av bufferten mot kapsel har mätts i BMT i Stripa /Pusch et al, 1985/ och i laboratorieskala vid kapselskjuvningsförsök /Börgesson, 1986/. Svälltrycksutvecklingen i de sex deponeringshålen i BMT skilde sig markant mellan de tre "blöta" hålen och de tre "torra" hålen beroende på att bevattningen var helt olika. Emellertid var de uppmätta svälltrycken likartade inom samma hål. I kapselskjuvningsförsöket ökade svälltrycket jämnt eftersom vatten tillfördes jämnt via ett filter som simulerade hela den omgivande bergytan.

#### **Termiskt inducerat porvattentryck mot kapseln**

Se avsnitt 4.6.6.

## **Kapselkorrosionsprodukter som ger tryck mot bufferten**

Preliminär modellering /Bond et al, 1997/ visade att påverkan inte var signifikant. I denna beräkning modellerades emellertid inte bufferten i detalj.

## **Vertikalrörelse av kapsel i buffert**

Ett fältförsök har gjorts i Stripa /Börgesson, 1989; Börgesson, 1993a/. I ett 3 m djupt borrhål med diametern 40 cm installerades en 100 cm lång kapsel med diametern 20 cm med omgivande bentonitblock. Kapselns rörelse mättes under 5 år via ett rör som var fäst på kapselns ovansida. På detta rör applicerades en stegvis ökad last som till slut uppgick till 12 ton. Den resulterande rörelsen var en hävning av kapseln trots den höga lasten. Numerisk simulering av detta försök gjordes med ABAQUS. Denna visade att hävningen beror på uppsvällning och densitetsminskning av den ovanliggande bentoniten.

Beräkning av kapselns rörelser för konceptet med 2 kapslar i ett deponeringshål har gjorts /Börgesson, 1993b/. Denna beräkning visar att den resulterande rörelsen blir en hävning som kommer tidigt och att den efterföljande sjunkningen på grund av kryprörelser är liten. En preliminär uppskattning för KBS-3-konceptets buffertdensitet är att sjunkningen blir försumbart liten eller att den kan bli negativ, dvs ha formen av en obetydlig hävning. En beräkning baserad på krypdata härledda från modellförsök i laboratorium innebär en slutsättning av mindre än 10 millimeter på  $10^6$  år för KBS-3-kapseln /Pusch och Adey, 1986/.

## **Överföring av skjuvspänningar från berg via buffert till kapsel**

Ingående studier av effekterna av bergskjuvning på kapsel och buffert har gjorts. I modellförsök i skala 1:10 har bergskjuvrörelser, motsvarande cirka 20 cm skjuvning i ett deponeringshål, simulerats /Börgesson, 1986/. Numerisk modellering av processen har också gjorts /Börgesson, 1992/.

Slutsatserna av dessa studier är att förståelsen för denna mekaniska process finns och att den går att modellera. Studierna visar också att påverkan på kapseln beror av skjuvningens hastighet och buffertens densitet. Kopparhöljet plasticerar och böjs vid en skjuvning av 10 cm och förväntade skjuvhastigheter om densiteten efter vattenmättnad är högre än cirka  $2 \text{ t/m}^3$ . Vid lägre densiteter tippas kapseln utan att plasticera.

## **Tidsperspektiv**

Påverkan på kapseln av ojämna svälltryck under vattenmättnadsfasen uppkommer inom ca 100 år varefter svällnings- och vattentrycken inte förväntas bli förändrade i basscenariot. En eventuell hävning av kapseln på grund av uppåtriktad svällning av bufferten sker under vattenmättnads- och homogeniseringsfasen dvs inom ca 100 år efter deponering. Den nedåtriktade krypningen orsakad av kapselns tyngd avtar logaritmiskt med tiden.

## **Sammanfattning av osäkerheter**

Processerna vid den mekaniska växelverkan mellan buffert och kapsel efter vattenmättnad förstår man ganska väl. Osäkerheten består framför allt i bevätningens jämnhet och tryckuppbyggnaden vid eventuella gasbildningar. Största osäkerheten består i att egenskaperna hos bufferten förändras vid en eventuell cementering eller omvandling.

## **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Beräkningar kommer att genomföras för de viktigaste delprocesserna, bland annat vertikalrörelse av kapseln. Hur svälltrycket påverkar kapseln beskrivs i avsnitt 3.6.2.

**Kapseldefektscenariot:** Se basscenariot. Dessutom tillkommer tryck från korrosionsprodukter från gjutjärnsinsatsen.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Effekterna av skjuvrörelser i geosfären analyseras.

### **4.6.4 Mekanisk växelverkan buffert/närfältberg**

#### **Överblick, allmän beskrivning**

Den mekaniska växelverkan buffert/närfältberg kan delas in i

1. Svälltryck från bufferten.
2. Tryck från kapseln via bufferten.
3. Friktionskrafter från bufferten vid svällning uppåt mot återfyllningen.
4. Termisk expansion av bufferten.
5. Konvergens av deponeringshål.
6. Skjuvrörelser vid glidning utefter spricka.

**Svälltryck från bufferten** överförs till berget men förväntas inte medföra annat än obetydliga bergrörelser. Den elastiska deformationen av berget vid de aktuella svälltrycken är liten på grund av bergets höga E-modul. Plastiska deformationer av rörelser längs sprickplan kan uppkomma längs bergkilar som går upp till tunnelgolvet.

**Tryck från kapseln** kan fortplantas via bufferten. Sådana tryck kan uppkomma av produkter från kapselkorrosion och gastrycksuppbyggnad.

**Friktionskrafter** uppkommer mot bergväggarna i deponeringshålet vid svällningen av bufferten mot återfyllningen. Processen är beskriven i avsnitt 4.6.2.

**Termisk expansion av bufferten** kan vara allvarligt för berget om bufferten är vattenmättad vid temperaturökningen. Denna process finns beskriven i avsnitt 4.6.6.

**Konvergens av deponeringshålet** uppträder genom att berget kryper på grund av de höga bergspänningarna efter berguttaget. Med antagande av ett anisotropt primärt spänningstillstånd med rimliga komponenter har beräkningar visat att diametern kan minska med någon centimeter efter 10 000 år /Pusch, 1995b/. Den resulterande densitetsökningen hos bufferten innebär en ökning av svälltrycket med någon MPa. Vid högre bergspänningar, orsakade av t ex glaciation, kan effekten eventuellt bli större.

**Skjuvrörelser vid glidning** utefter en spricka i berget är en process som kan vara allvarlig för kapseln om förskjutningen är snabb och stor. Processen är delvis behandlad i avsnitt 4.6.3 och kan modelleras okopplad till berget. Bergrörelser behandlas i processbeskrivningarna för geosfären, se avsnitten 5.6.4 och 5.6.5.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Påverkan av bufferten på berget är svår att undersöka experimentellt på annat sätt än att mäta svälltrycket mot berget. Detta har gjorts i BMT i Stripa /Pusch et al, 1985a/. Beräkningar av effekten på berget av gjutjärnsinsatsens korrosion visar att påverkan är liten /Bond et al, 1997/. Effekten på berget av buffertens svällning uppåt i deponeringshål har modelleras /Pusch och Börgesson, 1992/. Dessa studier visar att en bergkil vid dålig packningsgrad hos återfyllningen kan röra sig uppåt 0,2–0,3 m och sänka densiteten hos bufferten i ovan delen av deponeringshålet. Termisk expansion av bufferten åstadkommer liknande tryckökningar på berget som på kapseln. Teoretiskt skulle trycket kunna bli mycket högt. Detta behandlas i avsnitt 4.6.6.

Bergets påverkan på bufferten vid skjuvrörelser längs sprickplan har som redovisats i avsnitt 4.6.3 studerats både experimentellt och beräkningsmässigt. Denna process är inte skadlig för bufferten (om dess reologiska egenskaper inte har förändrats) utan enbart för kapseln.

### **Tidsperspektiv**

Processerna 1, 3 och 4 sker under de första 100 åren efter förvarets byggande. De övriga processerna uppträder eller kan uppträda under hela förvarets livslängd.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Osäkerheterna kring processerna 1-4 orsakas i huvudsak av osäkerheter hos andra processer och behandlas på andra ställen (kapselkorrosion, gasbildning, etc.).

Konvergens av deponeringshålen är i normalfallet försumbar.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Ingår i en integrerad beskrivning av närområdets utveckling.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot. Dessutom behöver effekten av järnkorrosionsprodukter diskuteras.

**Klimatförändringar:** Diskussion om effekten av konvergens av deponeringshål under islast.

**Jordskalv:** Diskussion om effekten av deformation av deponeringshål.

## **4.6.5 Mekanisk växelverkan återfyllning/närfältberg**

### **Överblick och allmän beskrivning**

I ett KBS-3 förvar ska återfyllningen ha en hydraulisk konduktivitet som inte nämnvärt överstiger den i det omgivande berget. I den preliminära utformningen av närområdet /Bäckblom, 1996/ anges en sammansättning av 15 procent bentonit och 85 procent bergkross. Återfyllningens egenskaper bestäms, förutom av sammansättningen, av salthalten i grundvattnet. Saltinnehållet har stor betydelse för egenskaperna, vilket beror på att både svälltryck och hydraulisk konduktivitet bestäms av bentonitens egenskaper i ballastens porsystem. Eftersom bentonitdensiteten är låg blir egenskaperna mycket känsliga för saltinnehållet. Detta medför att blandningen 15/85 kan vara en lämplig blandning för en plats med ett sött grundvatten medan en plats med saltare vatten kan kräva en högre andel bentonit. Återfyllningens exakta sammansättning kommer att väljas när alla data finns tillgängliga från den aktuella platsen.



Följande faktorer har betydelse för växelverkan återfyllning/närfältberg:

1. Återfyllningens svälltryck och tyngd.
2. Indirekta effekter av buffertens uppsvällning.
3. Kryprörelser i berget runt tunneln.
4. Blockutfall i tunnelns tak och väggar.

**Återfyllningens svälltryck och tyngd** fungerar som stöd mot bergutfall men ger i övrigt för små tryck för att påverka berget. Trycket är störst i golvet, om samma material används i hela tunneln, eftersom packningen förväntas bli bäst och tyngden av återfyllningen blir störst nära golvet. Svälltrycket beror dels på vilken sammansättning hos återfyllningen som väljs, dels på salthalten i grundvattnet. Ett önskemål är att uppnå minst 100 kPa svälltryck mot taket för att kunna motstå visst blockutfall och för att erhålla en kvarstående svällförmåga som kan täta eventuella effekter av kanalbildning och kryprörelser i återfyllningen. Vid saltvatten av Äspötyp synes 30 procent bentonit behövas emedan för sötvatten 10–20 procent synes vara tillräckligt enligt pågående laborieförsök i samband med återfyllningsförsök i Äspö.

**Indirekta effekter av buffertens uppsvällning** avser i första hand friktionen mellan återfyllningen och bergväggen i ovdelen på deponeringshålet och utbredningen av buffertens svälltryck genom återfyllningen mot taket. Trycket mot taket förväntas öka ca 400 kPa på grund av den senare effekten eftersom trycket genom återfyllningen sprids med en faktor ca 2:1.

**Kryprörelser i berget runt tunneln** uppkommer eftersom trycket från återfyllningen inte är tillräckligt för att förhindra eller påtagligt motverka berg rörelser i väggar och golv. Detta innebär att krypbetingade deformationer i närfältet omkring tunnarna och övre delen av deponeringshålen kommer att utbildas oberoende av återfyllningen tills deformationerna blivit så stora att återfyllningen sammanpressas tillräckligt mycket för att mobilisera signifikant mottryck. Effekten diskuteras vidare i avsnitt 5.6.6.

**Blockutfall i tunnelns tak och väggar** förhindras delvis av återfyllningens tryck mot bergväggen eftersom 100 kPa motsvarar trycket i taket från vikten av ett 5 m högt bergblock. (Om återfyllningen skulle sakna svälltryck kan successiv avlossning av block ske som följd av krypdeformationer /Pusch, 1994; Pusch, 1995b/. Stabil valvform utbildas efter en tid som kan uppskattas till några hundra eller något tusental år. Detta innebär att bergmassan som är belägen mellan återfyllningen och ett tänkt välvplan på 1–2 m avstånd från det ursprungliga tunneltaket blir rikligt uppsprucket och starkt genomsläppligt. Om tunnarna är så orienterade att kilformiga block blir instabila lossar de från berget och sjunker ned på fyllningen, som konsoliderar under lasten och ger upphov till ökad vidd hos den spalt som kan bildas mellan block och kvarstående berg /Pusch, 1994/.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Effekten av friktionen från upptryckningen av återfyllningen på grund av buffertens svällning har, som nämnts i avsnitt 4.6.2, modellerats /Pusch och Börgesson, 1992/. För övrigt har inga studier av samverkan berg/återfyllning gjorts med undantag för BMT i Stripa där trycket från återfyllningen mot berget mättes.

### **Tidsperspektiv**

Processerna 1 och 2 utbildas under vattenmättnadsfasen dvs inom ca 100 år från byggnation. Kryprörelser i berget fortgår under lång tid.

### Sammanfattning av osäkerheter

Svälltrycket mot taket är beroende av vilken densitet som kan uppnås vid packningen. Svårigheterna med packning mot taket gör det svårt att garantera ett visst svälltryck.

Svälltrycket uppkommer av bentoniten i ballastens porer och är beroende inte bara av medeldensiteten hos bentoniten utan också av homogeniteten. En inhomogen blandning kan ge högt svälltryck i början men om svälltrycket minskar på grund av homogenisering, genom att bentoniten sväller ut från porer med hög bentonitdensitet, är inte känt.

Osäkerheterna beträffande bergkryp behandlas i kapitlet om geosfären.

### Hantering i säkerhetsanalysen

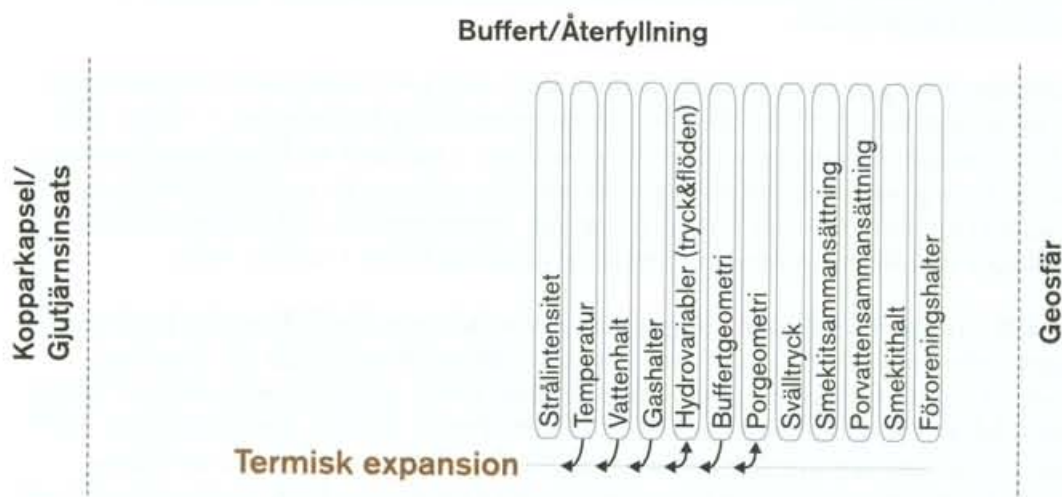
**Basscenario:** Processen ingår i en integrerad beskrivning av närområdets utveckling.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se avsnitt 5.6.6.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

### 4.6.6 Termisk expansion



Figur 4-12. Termisk expansion/kontraktion.

### Överblick

Vid temperaturförändringar i bufferten kommer volymen att förändras mer hos porvattnet än hos mineralfasen. Porvattentrycket stiger vid en temperaturökning och temperaturskillnader mellan olika delar av bufferten leder därmed till tryckskillnader som i sin tur ger en rörelse av porvatten för att utjämna skillnaderna. I gränsen mot återfyllningen kan processen leda till expansion av bufferten uppåt.

### Allmän beskrivning

En förändring av buffertens temperatur har följande mekaniska konsekvenser:

1. De mekaniska egenskaperna hos bufferten kan ändras.
2. Vatten, partiklar och porgas i bufferten expanderar.

Inverkan på de mekaniska egenskaperna i vattenmättat tillstånd är liten /Börgesson et al, 1995/. I omättat tillstånd är denna inverkan förmodligen liten men inte tillräckligt känd.

Expansionen av partiklarna och porgasen är förhållandevis små. Expansionen av vattnet, som är ca 100 gånger större än expansionen av partiklarna, dominerar helt denna process.

Inverkan av vattnets expansion är helt beroende av om bufferten är vattenmättad eller inte. **Innan vattenmättnad** kan volymen av vattnet expandera utan i stort sett annat motstånd än det som åstadkommes av porgasens kompressionsegenskaper. Vid konstant volym medför detta (något förenklat) att vattenmättnadsgraden ökar då temperaturen ökar. Konsekvenserna av detta är att undertrycket i porvattnet (sugpotentialen) minskar och att totaltrycket och porgastrycket ökar. Detta medför att svälltrycket mot en yttre begränsning ökar något. Vid konstant yttre tryck erhålls på samma sätt en liten ökning av volymen. Dessa förändringar är emellertid små och synes sakna praktisk betydelse. Vattenmättnadsgradsökningen blir ca 2 procent vid en temperaturökning på 50 grader.

För **vattenmättad** buffert kan konsekvenserna bli allvarigare, eftersom det inte finns några gasfyllda porer som kan svälja volymsökningen. Vid konstant volym blir portrycksökningen stor eftersom vattnet måste komprimeras. Teoretiskt kan den resulterande tryckökningen mot omgivningen uppgå till flera tiotal MPa vid de aktuella temperaturförändringarna. Tryckökningen motverkas emellertid av en dränering av vatten genom berget och återfyllningen, och därmed en sänkning i portryck, som sker parallellt med temperaturökningen. Denna process är relativt snabb och kan kraftigt minska portrycksökningen om temperaturökningen är långsam.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Processen har vid vattenmättade förhållanden simulerats i laboratorieförsök som visar att förväntade spänningsökningar uppkommer med efterföljande återgång av spänningarna under utdränering av vatten. En numerisk modellering av denna process /Börgesson, 1992/ visar att portrycksökningen uppgår till maximalt 8 MPa på grund av att berget dränerar bufferten. Denna beräkning förutsätter emellertid att berget fungerar som ett filter för porvattnet.

### **Tidsperspektiv**

Temperaturberäkningar /Thunvik och Braester, 1991/ visar att maximitemperaturen i bentoniten vid kapselväggen uppnås efter ca 10 år, vid bergväggen efter ca 30 år och längst bort från kapseln efter ytterligare ett tiotal år. Vattenmättnad kan i gynnsammaste fallet uppstå i hela bufferten efter 10–15 år. Det finns alltså risk för att en tryckökning uppstår i perioden 10–50 år efter deponering. Emellertid är temperaturökningen mycket måttlig och långsam under denna tidsperiod. Dessutom sker parallellt en temperatur-sänkning närmast kapseln efter ca 10 år vilket motverkar effekten.

Motsvarande process i återfyllningen är aktuell så länge som 500 år efter deponering, på grund av avståndet till närmaste kapsel. I återfyllningen är emellertid den hydrauliska konduktiviteten så hög att utdräneringen bör bli fullständig.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Processen är väl känd för vattenmättad bentonit. För ej vattenmättad bentonit är den termo-mekaniska teoribildningen inte komplett, men konsekvenserna av denna process bedöms i det fallet som oväsentliga för säkerheten.

## Hantering i säkerhetsanalysen

**Basscenario:** Processen ingår i den integrerade modelleringen av vattenmättnaden.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

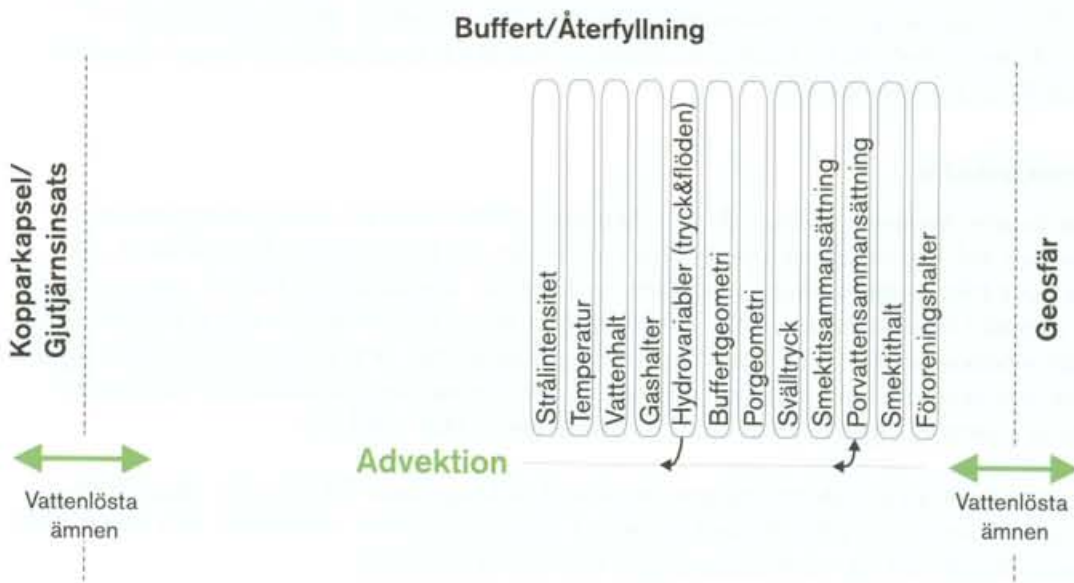
**Jordskalv:** Se basscenariot.

## 4.7 Kemiska processer

### 4.7.1 Inledning, cementering

Begreppet "cementering" har ofta använts i en bred betydelse för att beskriva effekter av kemiska och mineralogiska processer som kan leda till olika förändringar av de reologiska egenskaperna hos buffertmaterial, t ex ökad mekanisk hållfasthet, sprödhet eller försämrade svällningskapacitet. Ett antal helt olika processer kan tänkas ge likartade effekter och de underliggande reaktionerna kan förekomma direkt i själva montmorillonit-mineralet, i interlamellära utrymmet mellan montmorillonit-flak eller i accessoriska mineral. Den resulterande cementeringen behöver inte nödvändigtvis uppträda i samma område som den underliggande processen, eftersom frigjorda specier kan transporteras i bufferten beroende på olika rådande gradienter (termisk, koncentration etc.) och fällas ut i olika positioner och i olika form. De processer som diskuteras i det följande innefattar bland annat de reaktioner som framförts som tänkbara orsaker till cementering av bufferten. Däremot är det inte korrekt att diskutera cementering som en "egen" process i detta sammanhang.

### 4.7.2 Advektion



Figur 4-13. Advektion.

### **Överblick, allmän beskrivning**

Lösta ämnen kan transporteras med porvatten genom tryckinducerat flöde; advektion. Därigenom rör sig ämnen från områden med högre vattentryck till områden med lägre. Processen leder till omfördelning av lösta ämnen i porvattnet och påverkar alltså porvattensammansättningen.

Processen har betydelse i bufferten under den omättade perioden då en nettoströmning av vatten sker in till bufferten. Det huvudsakliga flödet under denna fas sker i princip i riktning mot kapseln under förutsättning att berget förser bufferten med grundvatten. Under mättade förhållanden dominerar transporten av ämnen i porvattnet helt av diffusion, se avsnitt 4.5.2, möjligen med undantag av plötsliga händelser som gaspulser eller jordskalv som kan orsaka tryckförändringar i bufferten. Vattenflöde i bufferten under omättade förhållanden behandlas i detalj i avsnitt 4.5.1.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Flera SKB-projekt har studerat flöde av vatten i bentonitmaterial, både i samband med vattenupptagning och efter fullständig vattenmättnad. Kvantitativa data finns i stor omfattning för olika fysikaliskt-kemiska förhållanden t ex, densiteter, temperaturer, saltlösningar.

Även intransport av lösta ämnen som följd av vattenflöde har undersökts. Genom undersökningarna är kunskapen om flöde genom vattenmättad bentonit god.

### **Tidsperspektiv**

Flödestransport i samband med vattenmättnaden sker i tidsperspektivet upp till 100-tals år. Flödestransport efter vattenmättnad förväntas vara försumbar i förhållande till diffusiv transport.

### **Naturliga analogier**

### **Sammanfattning av osäkerheter**

#### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Processen hanteras förenklat i en integrerad modellering av den kemiska utvecklingen i närområdet.

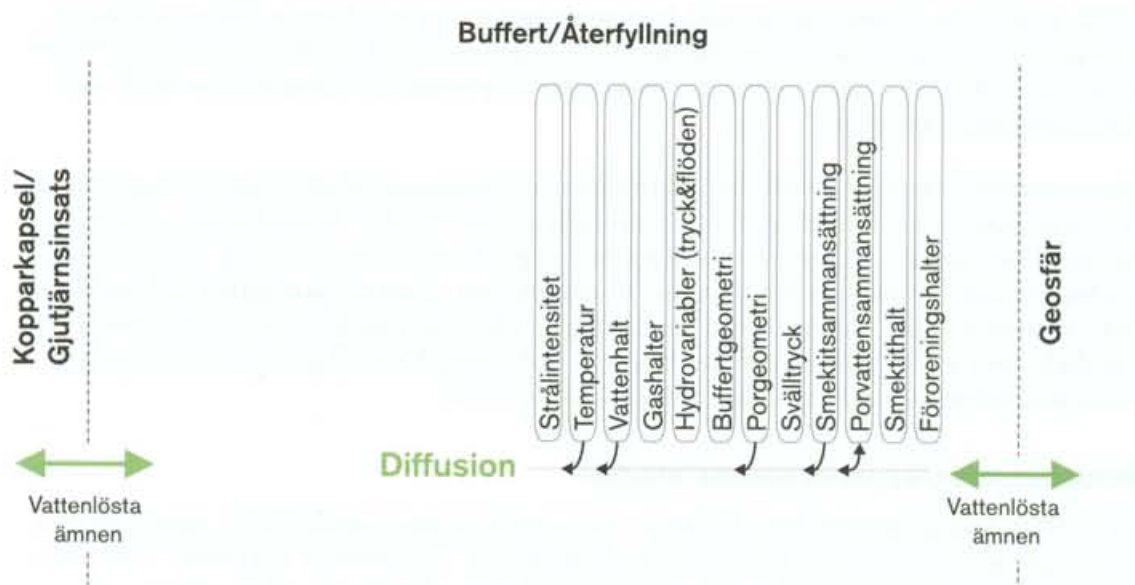
**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.



### 4.7.3 Diffusion



Figur 4-14. Diffusion.

#### Överblick

Lösta ämnen kan transporteras i stillastående porvatten genom diffusion. Därigenom rör sig ämnen från områden med högre koncentration till områden med lägre. Processen leder till omfördelning av lösta ämnen i porvattnet och påverkar alltså porvattensammansättningen.

Diffusionsprocessen är starkt sammankopplad med nästan alla kemiska processer i bufferten genom att den svarar för fram- och borttransport av reaktanter och reaktionsprodukter. Diffusion av  $\text{Na}^+$ - och  $\text{Ca}^{2+}$ -joner är t ex av avgörande betydelse för jonbytesprocessen, diffusion av  $\text{K}^+$  utgör en viktig begränsande faktor för illitiseringsprocessen etc. Därmed är diffusion en central process för hela den kemiska utvecklingen i bufferten.

#### Allmän beskrivning

Diffusion i bentonit är ingående studerat i samband med radionuklidtransport. Detta beskrivs i avsnitt 4.8.6. Beskrivningen är giltig för diffusion i allmänhet.

#### Modellstudier/experimentella studier

##### Tidsperspektiv

##### Naturliga analogier

##### Sammanfattning av osäkerheter

##### Hantering i säkerhetsanalysen

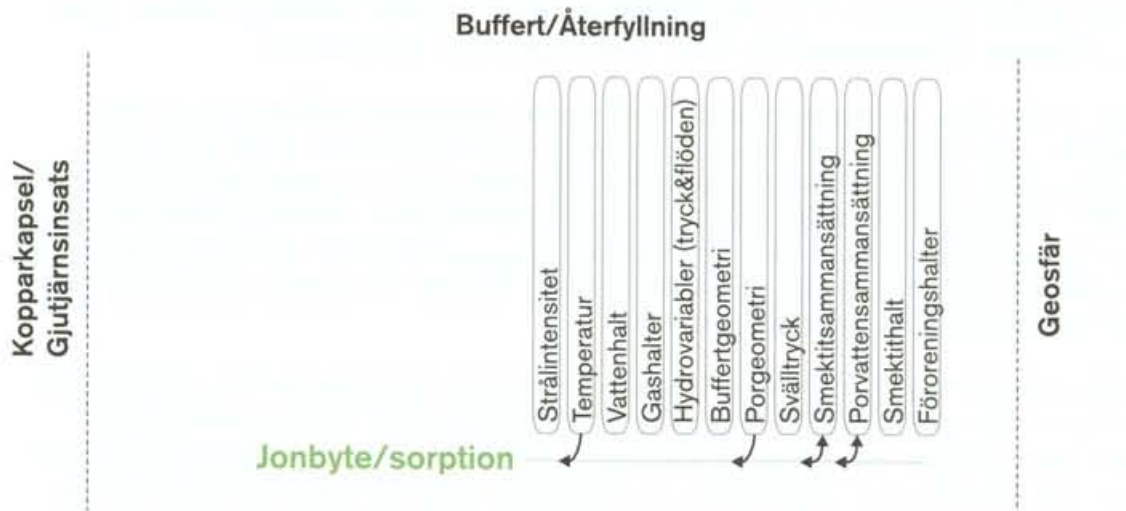
**Basscenario:** Processen hanteras förenklat i en integrerad modellering av den kemiska utvecklingen i närområdet.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot. Dessutom tillkommer diffusion av radionuklider.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador, se kapseldefektscenariot, annars basscenariot eventuellt med förändrad grundvattensammansättning.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador, se kapseldefektscenariot, annars basscenariot. Effekter av modifierad buffertjocklek till följd av bergrörelser kan behöva diskuteras.

#### 4.7.4 Jonbyte/sorption



Figur 4-15. Jonbyte/sorption.

#### Överblick

Då bentonitmaterialet i buffert och återfyllning sväller tas vatten upp mellan de enskilda partiklarna i huvudmineralet montmorillonit. Strukturen i bentonitmaterialet förändras därmed drastiskt vilket bland annat ger de önskvärda fysikaliska egenskaperna. Förmågan att binda vatten mellan de enskilda montmorillonitpartiklarna (interlamellär hydratisering) påverkas av joninnehållet i bentonitens porvatten. De fysikaliska egenskaperna kan därigenom i hög grad påverkas av joninnehållet i porvattnet.

Under de kemiska förhållanden som förväntas råda i ett djupförvar är det framförallt den totala salthalten och utbyte från  $\text{Na}^+$  till  $\text{Ca}^{2+}$  som kan påverka egenskaperna i nämnvärd omfattning. Både ökning av jonstyrkan och jonbyte till kalcium påverkar bentonitens svällförmåga huvudsakligen genom att begränsa den maximala vatteninbindningen. Material med låg montmorillonitdensitet, t ex återfyllningen, påverkas därigenom mer än material med hög montmorillonitdensitet, t ex bufferten.

Joner i buffertens porvatten kan bindas till bentonitmaterialets ytor. Företeelsen brukar beskrivas som sorption och är av väsentlig betydelse för buffertens funktion eftersom jonernas rörlighet därmed påverkas. Två huvudtyper av sorption kan urskiljas. Den ena karakteriseras av fysikaliskt dominerade bindningskrafter (van der Waals eller elektrostatisk bindning) och bindningen av jonerna är relativt svag. I den andra typen är bindningen av kemisk karaktär (kovalent bindning), och därmed avsevärt starkare. Väsentliga skillnader mellan de båda typerna är att den fysikaliska bindningen i hög grad styrs av koncentrationen av jonerna i systemet, medan den kemiska bindningen vanligen är starkt pH-beroende och sker till specifika reaktiva positioner och därmed har en uttalad begränsning i omfattning. Skillnader i bindningskaraktären mellan t ex natrium (fysika-



lisk bindning, jonbyteskaraktär) och kobolt-joner (kemisk bindning, ytkomplexkaraktär) som adsorberats på montmorillonit är väl dokumenterade experimentellt /Jansson och Eriksen, 1998/.

### **Allmän beskrivning**

Ytkemiska processer påverkar den mikrostrukturella uppbyggnaden och därmed de fysikaliska egenskaperna hos buffert- och återfyllningsmaterialen. Processerna kan grovt delas in i jonbyte och förändring av den totala mängden katjoner. Den viktigaste faktorn för båda processerna är porvattnets joninnehåll vilket huvudsakligen bestäms av de ursprungliga katjonerna i montmorillonitens utbytesposition, lättlösliga mineral i det ursprungliga bentonitmaterialet, samt av det omgivande grundvattnet.

För relativt låga saltkoncentrationer bestäms den potentiella utsvällningen av vilka katjoner som förekommer i utbytespositioner i montmorilloniten. Stora skillnader mellan olika katjoner är väl dokumenterade för olika typer av smektitmineral /Schultz, 1969/. För MX-80 bentonit gäller att flertalet envärdade joner i utbytesposition medför en stor potentiell svällning, medan större envärdade katjoner (från  $\text{Cs}^+$ ) och flervärdade katjoner medför en väsentligt mindre potentiell svällning. Kalium t ex innebär således inte något speciellt problem ur ytkemiskt perspektiv.

Olika katjoner binds olika hårt till montmorillonitytan beroende på hur polariserande jonen är. Generellt binds tvåvärdade joner hårdare än envärdade, varför tvåvärdade joner i porvattnet tenderar att ersätta envärdade joner i utbytesposition. Ett jonbyte från  $\text{Na}^+$  till  $\text{Ca}^{2+}$  kan förväntas ske i bentoniten i ett djupförvar. Även  $\text{H}^+$ -joner kan bindas till jonbytespositioner vilket innebär att pH-förändringar kan uppträda vid jonbyte och vid förändring av det totala katjoninnehållet. Vid höga halter av katjoner eller vid tvåvärdade joner i jonbytesposition tvingas  $\text{H}^+$ -joner ut i porlösningen och pH sjunker. Genom sina amfolytiska egenskaper, dvs att både kunna uppta och avge vätejoner, kan montmorilloniten motverka yttre förändringar i pH. Även vissa organiska ämnen kan bindas till jonbytespositioner.

Ökad jonkoncentration leder generellt till en reducerad potentiell svällning, och därmed till likartade effekter på porgeometrin som ett jonbyte till tvåvärdade joner /Norrish, 1954/. Ökad jonkoncentration leder vidare till en sänkning av svälltrycket på grund av osmotiska effekter, och till ändringar i porgeometrin som påverkar materialets hydrauliska konduktivitet /Karnland, 1997a/.

#### **Påverkan på porgeometri, hydraulisk konduktivitet och svälltryck i buffert:**

I bufferten är volymen så begränsad att en maximal svällning av bentoniten inte kan uppnås även efter ett fullständigt jonbyte till  $\text{Ca}^{2+}$ . Porgeometrin, och därmed även den hydrauliska konduktiviteten, förväntas därför inte ändras påtagligt efter ett sådant jonbyte. Mycket hög jonkoncentration i porvattnet leder till en signifikant minskning av svälltrycket på grund av osmotiska effekter, och till en ökning av den hydrauliska konduktiviteten. Maximalt innehåll av natriumklorid (36 procent, motsvarande mättad lösning) leder till en ungefärlig sänkning av svälltrycket med 50 procent, och till en ungefärlig ökning av den hydrauliska konduktiviteten med en faktor 10.

#### **Påverkan på porgeometri, hydraulisk konduktivitet och svälltryck i återfyllning:**

Begränsningar i befintlig packningsteknik, i kombination med mängden inblandad bentonit i återfyllningsmaterialet, leder till att densiteten hos montmorillonitfasen är avsevärt lägre än i bufferten. I grundtillståndet är därför montmorilloniten utsvälld till en volym som överstiger den maximala utsvällningen för materialet efter jonbyte med

Ca<sup>2+</sup>. Porgeometrin i återfyllningsmaterialet kommer därför att påtagligt förändras vid ett sådant jonbyte. En ökning av den totala mängden katjoner i porvattnet innebär motsvarande effekt redan vid relativt låga salthalter i grundvattnet (några procent NaCl). Förändringarna leder till en kraftig ökning av den hydrauliska konduktiviteten, förlorad kontakt med berget samt ökad risk för piping (kanalbildning vid kraftigt vattenflöde). Se vidare avsnitt 4.5.2.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Jonbyte är en relativt väl undersökt process och kvantitativa modeller finns för beräkning av jämviktstillstånd. Principellt gäller för porvatten med likvärdiga koncentrationer av envärda och tvåvärda joner att låga jonkoncentrationer ger en kraftig övervikt för flervärda joner i jonbytesposition.

Jonbyte från natrium- till kalciumtillstånd har modellerats för djupförvarsförhållanden. Beräkningar har gjorts för förväntade förvarsförhållanden med avseende på kalcium-mineral (kalcit) och grundvattenflöden /Wanner, 1992/.

Laboratoriestudier har genomförts med MX-80 bentonit som fullständigt jonbytt till kalciumform. Materialet undersöktes med avseende på hydraulisk konduktivitet och svälltryck. Salthalter på upp till 3,5 procent NaCl- och CaCl<sub>2</sub>-lösningar undersöktes för temperaturer på upp till 130 °C. Inga signifikanta skillnader mellan jonbytt och ursprunglig MX-80 bentonit kunde påvisas för densiteter som motsvarar buffertens. /Karnland et al, 1992/.

Effekten av hög jonkoncentration på svälltryck kan beräknas med termodynamiska modeller. Maximalt pessimistiska modeller ger att svälltrycket sjunker med ökande salthalt för att upphöra helt i bufferten vid en NaCl-halt av cirka 7 procent /Low, 1987/. Beräkningar baserade på mindre pessimistiska antaganden och experimentella förstudier visar att svälltryck kan förväntas även vid mättade saltlösningar /Karnland, 1997a/. Laboratoriestudier av kanadensisk bentonit ger stöd för den senare beräkningstekniken /Dixon et al, 1996/. Temperatureffekter på svälltryck och hydraulisk konduktivitet är inte experimentellt dokumenterade för mycket höga salthalter.

### **Tidsperspektiv**

Intransport av salt grundvatten kan ske under vattenmättnadsprocessen.

Indiffusion av framförallt Na<sup>+</sup> och Ca<sup>2+</sup> i bentoniten kan ske relativt snabbt efter vattenmättnaden om höga jonkoncentrationer förekommer i grundvattnet.

Jonbytesprocessen är i sig snabb varför upplösningshastigheten av andra mineral och transporthastigheten i grundvatten och bentonit kommer att styra jonbytet från Na<sup>+</sup> till Ca<sup>2+</sup>. Relevanta förändringar beräknas inträffa i hundraårsperspektiv enligt Wannans modell. Pessimistiska antaganden för buffertens permeabilitet i modellen ( $k = 10^{-11}$  m/s) innebär att återfyllningen inte kommer att avvika dramatiskt från beräknade buffertvärden vid låga salthalter. Vid högre salthalter (>1 procent) innebär den förhöjda konduktiviteten att omvandlingen kan förväntas i ett hundraårsperspektiv.

### **Naturliga analogier**

Åtskilliga bentonitförekomster innehåller porvatten med höga salthalter. Undersökningar av effekter av högt saltinnehåll i naturliga smektiter finns men har inte utnyttjats specifikt för förvarsrelaterade frågor.

### Sammanfattning av osäkerheter

En konceptuell beskrivning av svälltrycket i systemet montmorillonit – saltvatten föreligger i rapportform och visar att bufferten bibehåller ett ansevärt svälltryck även vid mättad saltlösning /Karnland, 1997a/. För kvantifiering av hydraulisk konduktivitet vid mycket höga salthalter (brines, dvs över 10 procent salthalt) finns en påtaglig osäkerhet. Temperatureffekter på jämviktskonstanter för jonbyte är inte väl dokumenterade. Temperatureffekter på svälltryck och hydraulisk konduktivitet vid mycket höga salthalter är inte undersökta. För system med relativt låga salthalter (under 3,5 procent) finns både konceptuell förståelse och en omfattande mängd mätdata.

### Hantering i säkerhetsanalysen

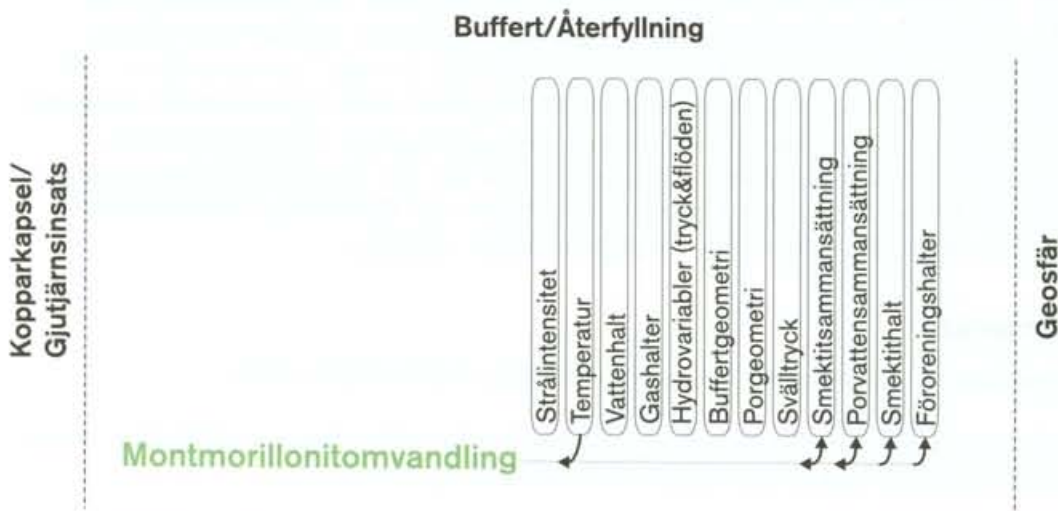
**Basscenario:** Processen ingår i en integrerad modellering av den kemiska utvecklingen i bufferten.

**Kapseldefektsscenario:** Se basscenariot. Den utveckling som beskrivs i basscenariot ligger till grund för löslighets- och sorptionsberäkningar i kapseldefektsscenario.

**Klimatförändringar:** Effekter av förändrad grundvattensammansättning diskuteras.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

## 4.7.5 Montmorillonitomvandling



Figur 4-16. Montmorillonitomvandling.

### Överblick

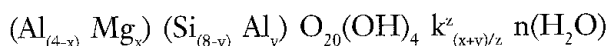
De fördelaktiga fysikaliska egenskaperna i bufferten, t ex svälltryck och låg hydraulisk konduktivitet, styrs av samverkan mellan vatten och montmorillonitmineralet i bentoniten. Denna samverkan kan påverkas av förändringar i porvattnet (se avsnitt 4.7.4) och av förändringar i montmorillonitens mineralstruktur. Montmorillonitens mineralogiska stabilitet är därför avgörande för buffertens funktion i ett djupförvar. Mineraliet är mycket stabilt i sin naturliga miljö men omvandlingar kan förväntas under speciella geokemiska betingelser.

Processerna kan leda till en minskning av montmorillonithalten, och det är därför viktigt att värdera i vilken utsträckning detta sker i ett långt tidsperspektiv.

En typ av omvandling som förekommer i naturliga sediment ger illitlera. Omvandlings-hastigheten för denna reaktion bestäms framför allt av tillgången på kalium samt av temperaturen i bufferten.

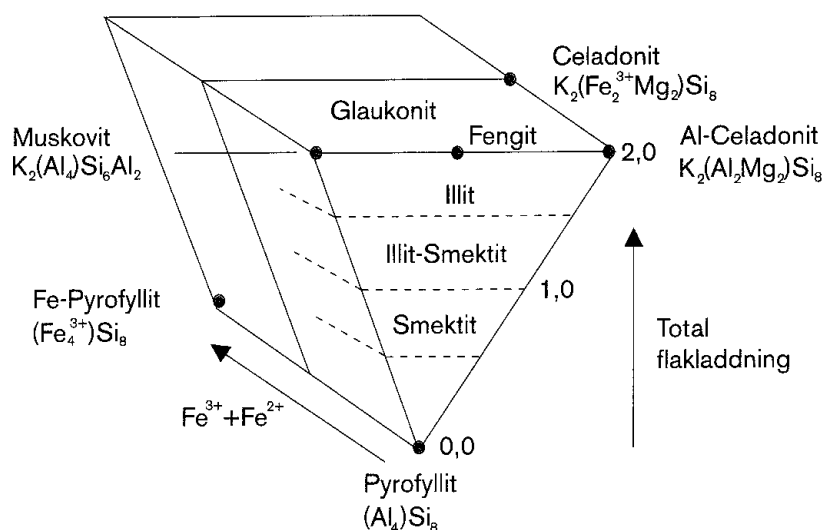
### Allmän beskrivning

Huvudmineralet i MX-80 bentonit är montmorillonit vilket normalt utgör mer än 75 procent av bentonitens massa. Strukturformeln för ideal montmorillonit kan skrivas



där summan av  $x$  och  $y$  definitionsmässigt kan variera mellan 0,4 till 1,2 enheter [laddning per  $\text{O}_{20}(\text{OH})_4$ ], och  $x > y$ . En viss mängd aluminium (Al) kan således betraktas som utbytt mot magnesium (Mg), och en mindre del kisel (Si) är utbytt mot aluminium (Al).  $k$  betecknar utbytbara katjoner, t ex  $\text{Na}^+$  eller  $\text{Ca}^{2+}$ , som behövs för att kompensera samtliga utbyten. Utbytet av trevärt aluminium mot tvåvärt magnesium leder således till en negativ nettoladdning i mineralstrukturen (flakladdning) som kompenseras av katjonerna.

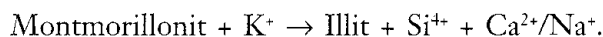
I naturen förekommer mineral med stor variation på flakladdning, se figur 4-17. Om laddningen  $(x+y)$  per  $\text{O}_{20}(\text{OH})_4$  är nära noll (pyrofyllit) sker i princip ingen växelverkan med vatten, vilket ger radikalt andra egenskaper än hos montmorillonit. Med tilltagande flakladdning och därmed fler kompenserande katjoner följer vanligtvis kraftigare samverkan med vatten. I material med tillräckligt stor flakladdning kan emellertid katjonen bindas ihop med mineralytorna och växelverkan med vatten upphör åter. Ändmineral för denna serie har laddningen 2 per  $\text{O}_{20}(\text{OH})_4$  (glimmermineral). De typiska egenskaperna hos montmorillonit förutsätter följaktligen ett mineral med medelhög flakladdning.



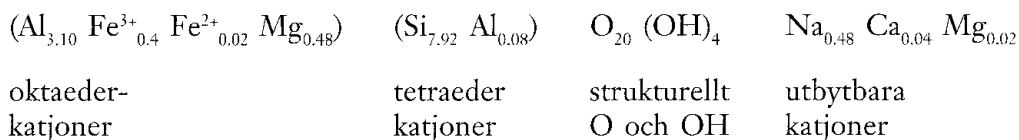
Figur 4-17. Sammansättning för ett antal dioktaedriska ändmineral baserat på formel-enheten  $\text{O}_{20}(\text{OH})_4$  och strukturområden för glimmer, illit och smektit (montmorillonit). Modifierat från Newman och Brown, 1987/.

Låsningen av laddningskompenserande katjoner är i hög grad beroende av jonens egenskaper. K<sup>+</sup>-joner binds t ex vid lägre flakladdning än Na<sup>+</sup>-joner vilka i sin tur binds vid lägre flakladdning än Ca<sup>2+</sup>-joner. Illit betecknar material med en flakladdning mellan montmorillonitens och glimmermineralens. I illitmaterial binds därför K<sup>+</sup>-joner men inte Na<sup>+</sup>- och Ca<sup>2+</sup>-joner.

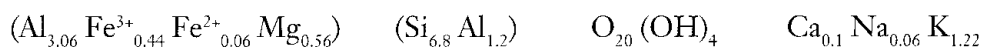
**Illitiseringsprocessen:** I naturliga system leder förhöjd temperatur till omvandling av montmorillonit i riktning mot illit. Processen kan förenklat beskrivas:



Den genomsnittliga mineralogiska sammansättningen för montmorilloniten i MX-80 är



vilket kan jämföras med en genomsnittlig sammansättning för 24 illit-material /Weaver, 1973/:

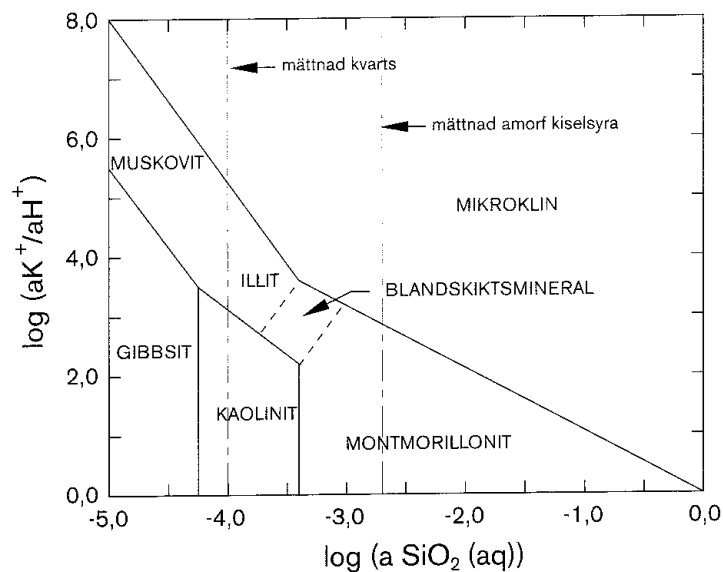


Omvandlingen innehåller således en markant ökning av flakladdningen, vilket kompenseras genom upptag och fixering av kaliumjoner från omgivande porvatten. Laddningsökningen sker vanligen genom en minskning av kiselinnehållet.

Omvandling kan ske som en partiell förändring av den ursprungliga mineralstrukturen, dvs kisel avgår och illit bildas direkt via upptag av kalium. Alternativt kan montmorilloniten gå i lösning och illit och kvarts nybildas lokalt eller efter transport.

Ingen allmänt vedertagen uppfattning kring de bakomliggande orsakerna till omvandlingen finns idag. En möjlig drivmekanism är att montmorillonitens porvatten generellt innehåller högre koncentration av löst kisel än mättnadsvärdet för kvarts, se figur 4-18. Vid förhöjd temperatur ökar möjligheten för kvarts att fällas ut och mer kisel kan därmed lösas från montmorilloniten, med ökande flakladdning som följd /Abercrombie et al, 1994/.

**Effekter av omvandling:** Förändring av montmorillonitens flakladdning leder till förändring av växelverkan med vatten och därmed till effekter på svälltrycket. Vid illitisering upphör i princip växelverkan och det tidigare inbundna vattnet mellan de enskilda flaken frigöres. Porgeometrin förändras därmed mot färre och större porer. Utsvällning mellan resterande montmorillonitflak kommer delvis att kompensera de negativa effekterna. Mängden kvarvarande montmorillonit kommer därvid att bestämma systemets svälltryck och hydrauliska konduktivitet. En höggradig omvandling leder till ett system som liknar återfyllningens. Känsligheten för joninnehållet i porvattnet ökar följaktligen successivt med omvandlingsgraden. Frigjort kisel förväntas leda till en försämring av buffertens reologiska egenskaper, se avsnitt 4.7.6.



*Figur 4-18. Stabilitetsområden för montmorillonit/illit med avseende på pH, kalium och kiselinnehåll vid 25 °C. Förenklat efter /Aagard och Helgeson, 1983/.*

### **Modellstudier/experimentella studier**

Illitiseringsprocessen är av stor betydelse ur flera synvinklar vid prospektering och utvinning av oljefyndigheter. Det stora kommersiella intresset i kombination med den mineralogiskt intressanta processen har lett till en mycket omfattande forskning sedan 1960-talet. Ett stort antal publikationer finns därför som underlag för antagandet att illitiseringsprocessen inte förväntas bli betydelsefull i ett djupförvar.

Argumentationen kan sammanfattas i tre områden:

- Bentonitmaterialen är nära mineralogisk jämvikt i utgångsläget.

I sin ursprungsmiljö utgör bentoniten vanligtvis ett system som är nära mineralogisk jämvikt, dvs endast obetydliga mineralogiska förändringar äger rum. I ett djupförvar är utbytet mellan buffert och omgivande miljö starkt begränsat, och buffertens massa är relativt stor. Bentoniten i bufferten kommer därför i utgångsläget att skapa sin egen kemiska miljö /se text Fritz et al, 1984/. Två tidiga förändringar av den kemiska miljön är emellertid uppenbara:

- Ökning av joninnehållet i porvattnet som följd av intransport av lösta ämnen under vattenmättnaden. För vanligt förekommande grundvatten är ökningen liten i förhållande till den naturligt höga katjonkoncentration som råder i montmorilloniten i bufferten.
- Temperaturökning som följd av bränslets sönderfall. Perioden med påtagligt förhöjd temperatur är emellertid relativt kort (<5000 år) /Thunvik och Braester, 1991/.

Systemet kan alltså förväntas vara nära mineralogisk jämvikt under huvuddelen av förvarsperioden.

- Temperaturinducerad omvandling begränsas av brist på  $K^+$ .

För att en omvandling till illit ska kunna äga rum måste laddningsökningen kompenseras av kaliumjoner. Eftersom den naturliga andelen kalium i bufferten kan hållas låg måste kalium transporteras in från omgivningen. Kaliumbehovet för att helt omvandla montmorilloniten i bufferten är ca fem viktsprocent, vilket motsvarar närmare ett ton kalium för ett deponeringshål. Beräkningar och modelleringar visar att intransporten förväntas ske mycket långsamt och att detta i sig utgör ett effektivt hinder för en betydande omvandling /Hökmark, 1995/.

- Omvandlingshastigheten vid förvarets maxtemperatur är mycket låg.

Kinetiska modeller har tagits fram för beräkning av omvandlingsgrad vid smektit-till-illit omvandling. Samband och konstanter har fastställts genom laboratorieförsök och genom jämförelser med naturliga system, t ex Eberl och Hower /1976/; Pytte /1982/; Huang et al /1993/. Modellberäkningar visar att omvandlingstakten i bufferten kan förväntas bli mycket låg vid de temperaturer som kommer att råda i ett djupförvar även vid relativt höga kaliumkoncentrationer /Karnland et al, 1995/.

### **Tidsperspektiv**

Relevanta förändringar av buffertens montmorillonithalt bedöms inträffa i miljonårs-perspektivet. Enligt t ex Huangs modell förväntas 50 procent av bentoniten vara opåverkad efter en miljon år, vid en kaliumkoncentration i porvattnet som motsvarar havsvattens (0,01 M) och en konstant temperatur av 90 °C, dvs maxtemperaturen i djupförvaret. För temperaturer och kaliumkoncentrationer som förväntas i djupförvaret modelleringen en omvandling på några få procent efter en miljon år.

### **Naturliga analogier**

Förutom i SKB-relaterade undersökningar är omvandling av smektit till illit väl dokumenterad för ett stort antal geologiska formationer. Naturliga sediment har studerats av bland annat Burst /1959/; Perry et al /1970/; Hower et al /1976/; Colten-Bradley /1987/, Lynch /1997/. Studierna visar bland annat att ökat sedimentdjup (ökande temperatur) leder till ökad illithalt, samt att låg tillgång på kalium kan kopplas till reducerad omvandling. Speciella formationer där temperaturpåverkan har erhållits från t ex vulkanisk aktivitet har visat en liknade principiell omvandling /se t ex Pytte, 1982; Lynch, 1985; Brusewitz, 1986/. Cementerande effekter som följd av omvandling har studerats specifikt av bland andra Hower /1976/; Boles och Franks /1979/.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Den detaljerade mekanismen för illitiseringsprocessen är inte klarlagd och konceptuella osäkerheter kvarstår därmed.

Utbildandet av en temperaturgradient kan ge en transport av löst kisel vilket möjligen skulle påverka inte bara omvandlingshastighet utan även omvandlingsprocessens karaktär. Omvandling av montmorillonit kan därför tänkas förekomma steglöst och i olika riktningar.

Vid temperaturstyrd utfällning av kisel som styrande kinetisk process kan man förvänta sig flakladdningar som maximalt motsvarar dem i illit. Om temperaturgradienten i bufferten leder till transport av kisel kan ökningen av flakladdningen tänkas bli högre och glimmermineral skulle kunna bildas även vid avsaknad av kalium. Processen innebär sannolikt inte något hot mot bufferten eftersom temperaturgradienten upprätthålls under en relativt kort period.



Förhållanden i bufferten som kraftigt avviker från de förväntade har i laboratorieexperiment visat sig kunna leda till snabbare omvandling för följande förhållanden:

- ångpåverkan, upprepade uttorkning, /Cotour, 1985; Karnland et al, 1994/,
- pH effekter, /högt pH: Velde och Vasseur, 1992; Karnland, 1997b; lågt pH: Zysset, 1992/.

Velde rapporterar påtagliga effekter även vid relativt låg temperatur (35°C). Karnland redovisar små effekter även efter omfattande perkolering med KOH, pH 13,8 under 16 månader. Perkoleringen motsvarade 10 porvattenbyten i bufferten.

Det höga Fe-innehållet i montmorilloniten kan tänkas påverka egenskaperna genom:

- redox-reaktioner i oktaederposition,
- cementering med järnföreningar vid upplösning av montmorilloniten,
- kloritisering, dvs inbindning av t ex Al-, Fe-, eller Mg-hydroxid mellan kvarvarande montmorillonitflak vid upplösning av montmorillonit. Processen leder till en för-lorad svällbarhet men med större flakavstånd än vid illitisering. Större omvandlings-grad krävs därför för att förändra materialets egenskaper jämfört med illitisering.

**Experimentella bekräftelser:** Eftersom processerna är mycket långsamma måste laboratorieförsök göras vid accelererade förhållanden, dvs vid höga temperaturer och kaliumkoncentrationer, för att få mätbara resultat /Karnland et al, 1995/. Jämförelser med naturliga omvandlingar ger en möjlighet att delvis bekräfta laboratorieresultaten /Elliott, 1996/.

Vid transportberäkningar utgör diffusionskonstanterna i berg, bentonit och omvandlad bentonit en osäkerhet. Föreningar i bentoniten av kaliumrika mineral kan förekomma. Frigörelse av kalium från dessa kan beräknas. Även för rimligt pessimistiska antaganden för samtliga förhållanden utgör beräknade omvandlingar inte ett hot mot buffertens funktion.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

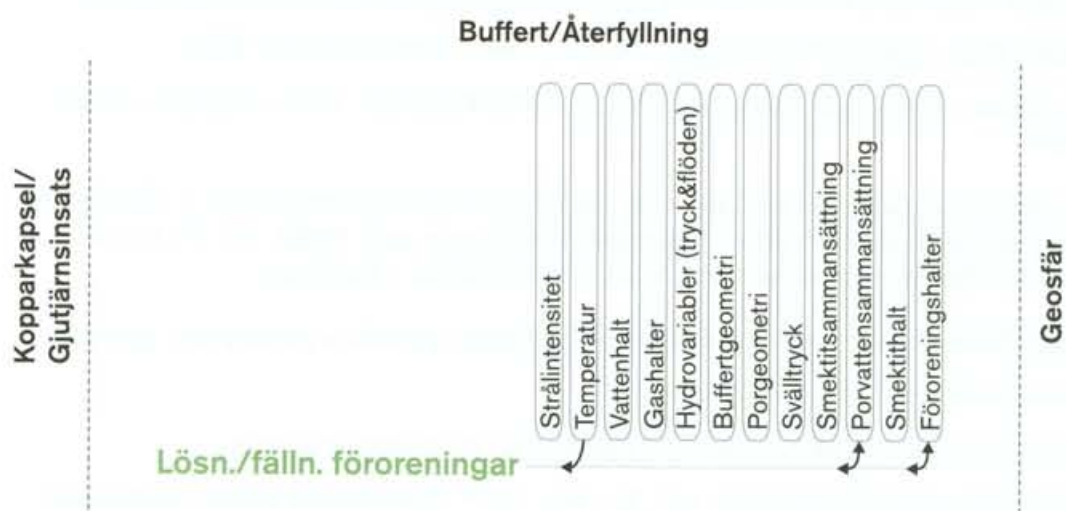
**Basscenario:** En övre gräns för processens omfattning över tiden fås genom att uppskatta initial mängd kalium samt intransport av kalium från grundvatten och åter-fyllning. En viktsenhet kalium svarar mot 20 viktsenheter montmorillonit i omvandlingen. Uppskattning görs för såväl buffert som återfyllning.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Som basscenariot men med modifierade flöden och kalium-koncentrationer. Flödet kan förväntas öka till följd av infiltration av glacialvatten, medan kaliumhalten bör minska.

**Jordskalv:** Som basscenariot men eventuellt med modifierade flöden. Flöden kring deponeringshål kan påverkas. Detta kan eventuellt leda till att hanteringen behöver modifieras jämfört med basscenariot.

## 4.7.6 Lösning/fällning föroreningar



Figur 4-19. Lösning/fällning föroreningar.

### Överblick

Buffertmaterialet, bentonit MX-80, består förutom av montmorillonit även av andra sekundära accessoriska mineral samt av föroreningar. I förvarsmiljön kan dessa lösas upp och ibland åter fällas ut beroende av vilka förhållanden som råder.

Utfällning av karbonater och sulfater närmast kapslarna innebär att en porös kontaktzon mellan bufferten och kapselytan kan komma att utbildas och att buffertens hållfasthet ökar. När värmeperioden är över och temperaturgradienter inte längre råder i bufferten är det sannolikt att utfällningarna till viss del löses och i jonform diffunderar ut genom bufferten. Utfällning av kisel kan bland annat minska svällpotentialen.

### Allmän beskrivning

MX-80 bentonit innehåller ungefär 75 procent Na-montmorillonit och 25 procent andra mineral. De övriga mineralen är i huvudsak kvarts, plagioklas, samt låga halter av kalcit ( $\text{CaCO}_3$ ), siderit ( $\text{FeCO}_3$ ), pyrit ( $\text{FeS}_2$ ) och andra lermineral, tabell 4-3.

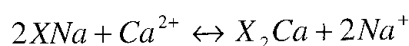
Tabell 4-3. Föroreningar och accessoriska mineral i MX-80 bentonit /Müller-Vonmoos et al, 1983/.

Komponent	Halt (viktprocent)
Karbonat (kalcit)	1,4
Kvarts	15
Pyrit	0,3
Ickesvällande lermineral	1,4
Kaolin	<1
Fältspat	5-8
Humusämnen	0,04-0,4
Övrigt	2

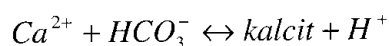
Kalcit- och pyritinnehållet har avgörande betydelse för pH, Eh och alkalinitet i förvarets närområde. Bentoniten innehåller också små mängder gips ( $\text{CaSO}_4$ ) som kan ha betydelse under ett tidigt skede med höga temperaturer.

De accessoriska mineralen i bentoniten är stabila i den miljö där den ursprungligen bröts. I förvaret kommer de däremot att utsättas för ett vatten som i vissa avseenden skiljer sig från det på ursprungsplatsen, både när det gäller sammansättning och temperatur. De flesta accessoriska mineralen i bentoniten är trots det stabila i normala svenska grundvatten. Det finns dock några upplösningsprocesser som är viktiga:

**Kalcitupplösning:** Kalcit är stabilt i grundvatten. I bentoniten kommer dock jonbytesprocessen (4.7.1) att konkurrera om de fria kalciumjonerna. Reaktionen

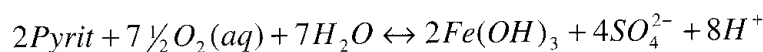


konkurrerar med



Karbonathalterna i de grundvatten som kan komma i fråga är tillräckligt låga för att jonbytesprocessen ska dominera och kalcit kommer att lösas upp. Detta innebär samtidigt en förbrukning av vätejoner dvs en höjning av pH. Vattenomsättningen i bufferten är mycket låg och reaktionerna nära jämvikt.

**Pyritoxidation:** Pyrit är också stabilt i grundvatten. Inträngande syrehaltigt vatten kan dock oxidera pyriten enligt



Pyritoxidation frigör protoner och kan därigenom sänka pH, men detta buffras med den tidigare nämnda kalcitupplösningen. Det finns tillräcklig mängd pyrit i bufferten (MX-80 materialet) för att förbruka allt initialt syre som finns kvar vid förslutningen av förvaret. Mängden är också tillräcklig för att förhindra att eventuellt inträngande syresatt vatten ska komma i kontakt med kapseln under hundratusentals år.

**Upplösning av kalciumsulfater:** Kalciumsulfater (gips och anhydrit) och kalcit har lägre löslighet vid höga temperaturer än vid låga. I ett tidigt skede, när kapseltemperaturen är hög är det möjligt att de löses upp i den kallare delen av bufferten och faller ut på kapselytan.

**Utfällning/upplösning av kisel:** Den största andelen av föroreningarna i bentoniten utgörs av kvarts och fältspater. Dessa är normalt stabila i den naturliga förvarsmiljön, men deras lösligheter ökar med ökad temperatur. I deponeringshålen där en temperaturgradient råder, ger den högre temperaturen vid kapseln, där mättnaden med avseende på löst kisel i porvattnet ger den högsta Si-koncentrationen, upphov till transport av detta element i riktning mot det kallare berget och anrikning och kiselutfällning kan därför bli betydande i de yttre delarna av bufferten. Vid BMT-försöket i Stripa analyserades bufferten med avseende på fördelningen av kisel men någon säker slutsats om möjlig anrikning i den kallaste delen kunde inte dras /Pusch, 1985b/.

### **Modellstudier /experimentella studier**

Hydrotermalförsök med renad standardbentonit (SWY-1) upphettad till 150–200 °C har visat att avsvälning leder till utfällning av kisel föreningar i olika form. Utfällningen antas ge cementeringseffekter, bland annat en hållfasthetsökning som påvisats vid flera laboratorieundersökningar /Pusch och Karnland, 1988; Pusch och Karnland, 1991/. Omfattningen av utfällningarna är enligt dessa undersökningar beroende av temperaturen. Vid den högsta temperaturen i bufferten (90 °C) var cementeringen inte av en sådan omfattning att den kan betraktas som problematisk. Försöken genomfördes utan temperaturgradient vilket inte kan betraktas som pessimistiska förhållanden.

Utfällning av sulfat och karbonat kunde observeras vid ettåriga försök med hydrotermal behandling av MX-80. XRD-analyser indikerade att sulfater och kalcit gått i lösning och transporterats till den heta järnytan där de fällt ut. Det är också sannolikt att fältspater gått i lösning. Kvarts har anrikats vid den kallare randen /Pusch et al, 1993/.

Flera laboratorieundersökningar har genomförts i syfte att studera fördelningen av löslösta joner i buffertens porutrymme efter vattenupptag mot en temperaturgradient. Effekter av lerans densitet, vattenmättnadsgrad, försökstid, öppna eller stängda förhållanden samt joninnehåll och tryck i omgivande vattenlösning har undersökts. Försöksresultaten visar att anrikningen av lösta ämnen var obetydlig i prov med hög lerdensitet, och att ett högt ursprungligt vatteninnehåll och högt omgivande vattentryck reducerar anrikningen i prov med lägre densitet /Karnland, 1995/. Liknande studier genomförs för närvarande i fältförsök i Äspö (LOT-projektet), samt i laboratorieförsök i ENRESA:s regi.

### **Tidsperspektiv**

De kemiska utfällnings/upplösningsprocesserna är viktigast i ett tidigt skede när temperaturen är hög och syre finns kvar i förvarstunnorna. I senare skeden går de flesta processerna mot jämvikt. De accessoriska mineralen i bentoniten är dock mycket viktiga om kemin i förvaret skulle störas av någon anledning, både pH och Eh buffras mycket effektivt av de mineral som är vanliga i olika bentonitmaterial.

### **Naturliga analogier**

Utbildande av saltskorpor i torra områden påminner i princip om vissa förhållanden under vattenmättnadsfasen. Direkta SKB-relaterade studier har inte genomförts men en omfattande litteratur finns i ämnet.

Kiselutfällning förekommer på ett stort antal platser där hydrotermal omvandling av bentonit har skett. Ett flertal vetenskapliga artiklar finns publicerade, några direkt kopplade till förvarsfrågeställningar /se t ex Pusch et al, 1998/.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Merparten av de tänkbara processerna är i sig väl kända och kan modelleras för mindre komplicerade system. Förhållandena i bufferten med avseende på transport och reaktionskinetik är emellertid inte helt klarlagt för alla processer. Transport av ämnen kan ske i olika form och kan i dag inte helt beskrivas. Speciellt finns kvarstående modelleringsproblem under vattenmättnadsfasen då vatten transporteras både i gasfas och som vätska. Modellering av systemet måste därför kopplas till de THM processer som pågår parallellt med transport och reaktionskinetik.

Kisel är det vanligaste ämnet i bufferten och det förekommer i en rad olika mineral och faser. Följande processer är inte helt klarlagda:

- frigörelse av kisel från de olika mineralen,
- transport av löst kisel till följd av den rådande temperaturgradienten,
- utfällning av kiselmineral.

Speciellt utfällning av kisel är principiellt komplicerad eftersom den beror av flera samverkande faktorer och eftersom flera tänkbara former förekommer, både kristallina och amorfa.

Den största osäkerheten gäller omfattningen av cementeringsprocesser som följd av lösning, transport och utfällning av kisel eller Si/Al/Ca-föreningar. Man kan idag inte med rimlig säkerhet förutsäga cementeringens omfattning och konsekvenser.

### Hantering i säkerhetsanalysen

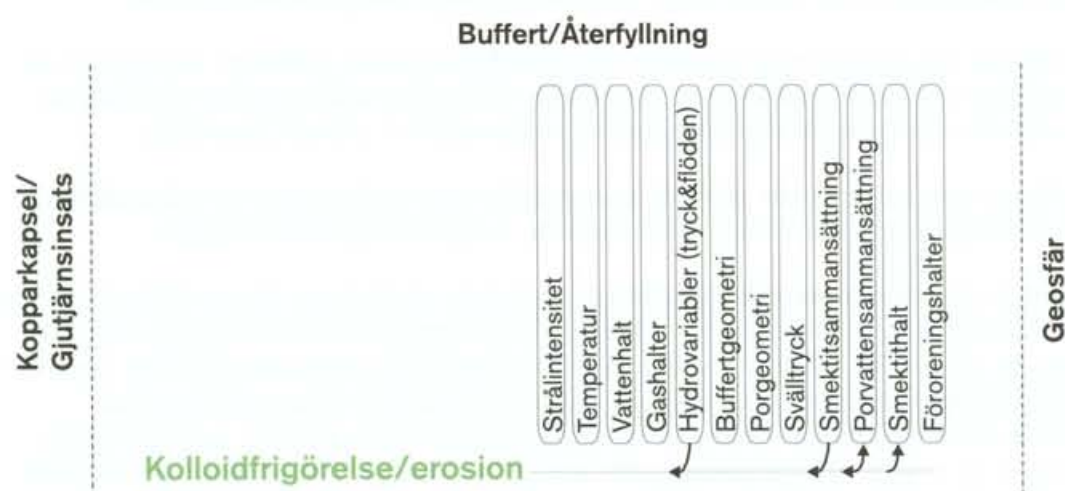
**Basscenario:** Processerna ingår i modelleringen av den kemiska utvecklingen i bufferten.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot. Den utveckling som beskrivs i basscenariot ligger till grund för löslighets- och sorptionsberäkningar i kapseldefektscenariot.

**Klimatförändringar:** Effekter av förändringar i grundvattensammansättningen diskuteras.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

## 4.7.7 Kolloidfrigörelse/erosion



Figur 4-20. Kolloidfrigörelse/erosion.

### Överblick

Montmorillonit från den expanderande bufferten kan tränga in i sprickor kring deponeringshål. Grundvattnet i sprickorna kan erodera bufferten. Det finns två orsaker till erosion:

- Mekanisk erosion där partiklar rycks bort av det strömmande vattnet.
- Kemisk erosion där låg salthalt dispergerar lergelen.

Processerna påverkas av grundvattenflödet, grundvattnets och lerans sammansättningar och sprickgeometrin. Resultatet av processen kan bli att densiteten i bufferten minskar, vilket kan ha betydelse för en rad andra processer i bufferten, och att bufferten förser grundvattnet med lerkolloider, som potentiellt skulle kunna transportera radionuklider.

### **Allmän beskrivning**

Bentonitens känslighet för erosion beror av densiteten som i sin tur beror av det externa tryck som håller emot svällningen. Om bentoniten tillåts expandera fritt sväller den ut till en gel med mycket låg densitet. Eftersom gelen är uppbyggd av tunna montmorillonitflak blir erosionsbenägenheten en fråga om storleken på kohesionen mellan de expanderade flaken.

I en spricka sker inte helt fri expansion på grund av friktion mellan bentonit och sprickvägg. Friktionen ger upphov till ett kvarstående tryck i bentoniten som minskar med inträngningsdjupet. Efter färdig svällning uppstår en jämviktssituation där ytterligare expansion hindras av friktionskrafter. Längst in vid gelens yta mot vattnet i sprickan är emellertid trycket nära noll eftersom det i centrum på ytan inte finns några friktionskrafter. Det innersta gelskiktet är alltså expanderat och känsligt för erosion.

Om *tillräcklig vattenhastighet* uppstår mot gelens ytskikt eroderas det yttersta skiktet bort. Under detta skikt är densiteten högre och gelen mer motståndskraftig. En ny jämvikt uppstår och gelen får samma densitet som innan erosionen och processen upprepas. Erosionens hastighet begränsas endast av utsvällningens hastighet och transportkapaciteten hos det strömmande vattnet.

Bufferten består huvudsakligen av ett mycket stort antal montmorillonitpartiklar, i form av mycket tunna mineralflak med en tjocklek av 10 Å, och en längd/bredd av upp till 1 millimeter. Bindning i bufferten av dessa partiklar till varandra beror av de fysikalisk-kemiska förhållanden som råder, bland annat temperatur och jonkoncentration.

Mineralflaken kan frigöras från varandra huvudsakligen genom svällning, dvs genom att vatten tas upp mellan flaken. I deponeringshålen förhindras svällningen av den begränsade volymen, och enskilda kolloidala partiklar kan därför i princip inte bildas.

Fri svällning som leder till att enskilda mineralflak, eller små grupper av mineralflak, avskiljs (dispergering) skulle kunna ske i sprickor i deponeringshålens väggar.

**Inverkan av grundvattensammansättning:** Teoretiskt skulle lera kunna bilda partiklar som är tillräckligt små för att kunna diffundera iväg i grundvattnet (kolloider). För att lergelen ska vara stabil och inte dispergeras till en kolloidal suspension krävs att vattnet innehåller tillräckligt höga halter positiva joner. Högt laddade joner (starkt polarisering) är mest effektiva. Halterna av tvåvärdade joner, framför allt  $\text{Ca}^{2+}$  i djupa svenska grundvatten är i regel fullt tillräckliga. Om halten är över 0,1 mM (4 ppm) fås en stabil lergel. Envärdade joner som  $\text{Na}^+$  kan fylla samma funktion, men då krävs att halten är mycket högre.

**Inverkan av grundvattenflöde:** Beräkning av kritiskt hög hastighet hos strömmande vatten för att erodera lergeler i sprickor visar att den överstiger medelhastigheten i det helt vattenmättade förvaret minst 1 000 gånger. Det innebär att flödes hastigheten i kanaler i vilka bentonit trängt ut inte kan ge borttransport av smektitaggregat då normala hydrauliska gradienter råder /Le Bell, 1978/.

I återfyllningen är risken för erosion störst om en spalt finns i taket mot berget där densiteten hos återfyllningen blir lägst. Detta kan inträffa genom att en spalt finns från

början därför att packningen är otillräcklig eller genom att kanalbildning uppstår i inpackningsskedet.

Då bevätningen utbildats helt strävar återfyllningen att expandera och konsolidera gränzonen och risken för fortsatt erosion försvinner. Vid den låga densitet som återfyllningen sannolikt kommer att få vid tunneltaket räcker emellertid inte expansionsförmågan hos återfyllningen enligt förvarets specifikation för att upprätthålla kontakt med tak och övre väggdelar i tunnarna och risken för borttvättning och betydande heterogenitet hos återfyllningen kvarstår. Detta kan undvikas genom att återfylla med block med högre bentonithalt nära tunneltaket.

I SR 97 förutsätts att återfyllningen har en hydraulisk konduktivitet som ligger i samma storleksordning som den i det omgivande berget. För att uppnå detta kan det krävas en platsspecifik anpassning av återfyllningen.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Flera laboratoriestudier har givit underlag för uppskattning av penetrationshastigheten och modeller har härletts som stämts av mot fälldata /Le Bell, 1978/.

Den beräknade inträngningen hos bentonitgelen är enligt modellerna ca 0,15 millimeter efter 2 år vid spricköppningen 0,1 millimeter och 15 millimeter vid 1 millimeter öppning. Efter 10 år är motsvarande värden 0,52 millimeter respektive 52 millimeter och efter 1000 år 1,5 millimeter respektive 150 millimeter. Efter 100 000 år kan inträngningsdjupet vara 2,5 millimeter respektive 250 millimeter med en medeldensitet av lergelen av 1500 kg/m<sup>3</sup>. Resultatet av urgrävningen av de simulerade deponeringshålarna i Stripa BMT var att inträngning av buffert med sådan densitet i vattenförande sprickor med ca 0,5 millimeter öppning skett till 5–10 millimeter djup på 2–3 år, vilket är i god överensstämmelse med förutsägelserna.

Slutsatsen av modellberäkningarna, laboratorieförsöken och fälterfarenheterna är att förlusten av buffert ut i sprickor som har kanalvidder som kan accepteras med hänsyn till vatteninströmningen vid appliceringen av bufferten, dvs ca 0,1–0,5 millimeter, kommer att vara försumbar.

Halten av kolloider som bildas från bentonit i granitiskt grundvatten har testats i laboratorieförsök /Missana et al/. Med en mättad buffert låg den utlakade halten av kolloider under 1 ppm.

### **Tidsperspektiv**

Erosion och kolloidbildning, i den mån processerna förekommer, är aktuellt i alla tidsskalor.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

De gjorda uppskattningarna antyder att risken för erosion av stora mängder bentoniten är liten, både vad gäller kemisk och mekanisk erosion. Processen bör dock studeras ytterligare.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Resonemanget ovan antyder att erosion av bufferten inte är av betydelse för förvarets långtidfunktion. Processen försummas i SR 97 men bör studeras ytterligare.

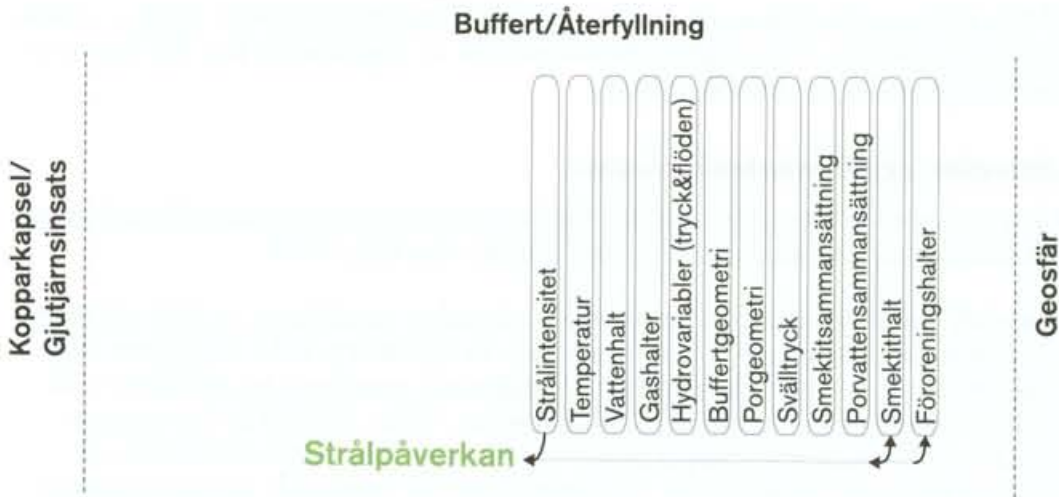


**Kapseldefektsscenario:** Se basscenario. Se även radionuklidtransport med kolloider i geosfärsprocesser.

**Klimatförändringar:** Se basscenario. Effekten av förändringar i grundvattensammansättning kan behöva diskuteras.

**Jordskalv:** Se basscenario.

#### 4.7.8 Strålinducerad montmorillonitomvandling



Figur 4-21. Strålinducerad montmorillonitomvandling.

#### Överblick, allmän beskrivning

Montmorillonit i bufferten kan brytas ned av  $\gamma$ -strålning. Resultatet blir en minskning av montmorillonithalten.

#### Modellstudier/experimentella studier

Experiment har visat att de ackumulerade stråldosen bentoniten kommer att utsättas för i ett djupförvar inte orsakar några mätbara förändringar av montmorillithalten.

MX-80 bentonit mättad med svagt bräckt vatten till en densitet av 2050 kg/m<sup>3</sup> bestrålades under ett år med totala stråldosen 3·10<sup>7</sup> Gy. Provet var inneslutet i en cylinder vars ena slutna ände utgjordes av järn och bestrålades med en <sup>60</sup>Co-källa medan den andra utgjordes av ett poröst stålfilter via vilket ett vattentryck av 1,5 MPa verkade /Pusch et al, 1993/. Den bestrålade änden, som hade en adsorberad dosrat av 3972 Gy/timme, hölls vid 130 °C och den motstående, som hade en dosrat av 456 Gy/timme, vid 90 °C.

Mineralanalyser (XRD, IR, CEC) av detta prov och av ett parallellprov som inte utsattes för strålning men för samma hydrotermala miljö som det bestrålade provet, visade ej någon signifikant ändring av montmorillonitmängden i något av proven.

#### Tidsperspektiv

#### Naturliga analogier

### Sammanfattning av osäkerheter

Endast ett försök har genomförts och detta avsåg endast  $\gamma$ -strålning. Effekten av  $\alpha$ -strålning vid ett kapselbrott är således inte beaktad.

### Hantering i säkerhetsanalysen

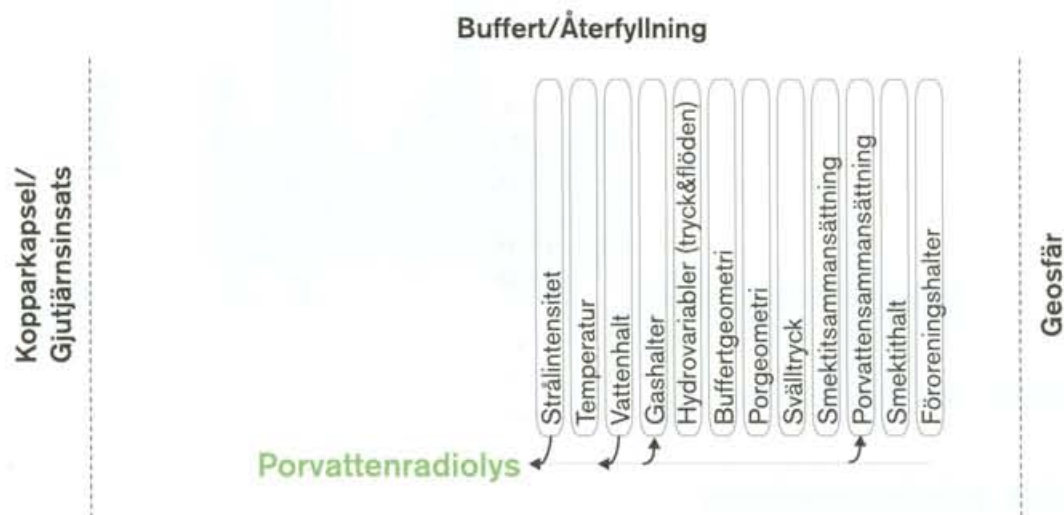
Basscenario: Processen försummas.

Kapseldefektscenario: Se basscenariot.

Klimatförändringar: Se basscenariot.

Jordskalv: Se basscenariot.

## 4.7.9 Radiolys av porvatten



Figur 4-22.  $\gamma$ -radiolys av porvatten.

### Överblick, allmän beskrivning

Gammastrålning från bränslet som tränger genom kapseln kan sönderdela porvatten genom radiolys varvid OH-radikaler,  $H_2$ ,  $O_2$  och flera andra komponenter bildas. Syret förbrukas snabbt genom oxidationsprocesser som påverkar redoxpotentialen, medan vätgasen transporteras bort. Kapselns vägg tjocklek är dock tillräcklig för att effekten av  $\gamma$ -radiolys på utsidan ska bli försumbar /Werme, 1998/.

### Modellstudier/experimentella studier

#### Tidsperspektiv

#### Naturliga analogier

### Sammanfattning av osäkerheter

## Hantering i säkerhetsanalysen

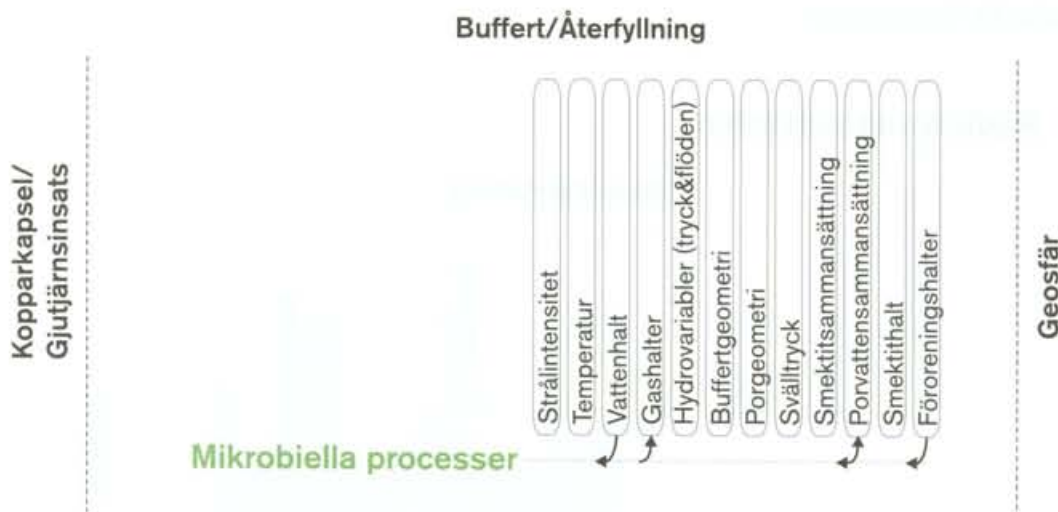
**Basscenario:** Processen försummas.

**Kapseldefektscenario:** Processen försummas.

**Klimatförändringar:** Processen försummas.

**Jordskalv:** Processen försummas.

### 4.7.10 Mikrobiella processer



Figur 4-23. Mikrobiella processer.

#### Överblick, allmän beskrivning

Mikrobiella processer kan under vissa förhållanden resultera i bildning av gas och sulfid. Gasbildning kan leda till störande mekanisk påverkan på bufferten och sulfid kan korrodera kopparkapseln. Sulfidbildning måste ske i bufferten, nära kapseln och vara betydande för att korrosionsangrepp ska bli möjliga, främst beroende på att lösligheten av sulfid är mycket låg och därmed även den diffusiva transportkapaciteten. Det är också känt att bakterier kan binda och transportera metaller i jonform /Pedersen och Albinsson, 1991/. För att ovan beskrivna processer ska ske måste bakterierna vara aktiva och ha tillgång till vatten, näring och utrymme /Pedersen och Karlsson, 1995/.

Många bakterier är mycket strålningsresistenta och strålningsintensiteten i bufferten utgör inget hinder för bakteriellt liv där.

Vid ett fullskaleexperiment med buffertmaterial bestående av 50/50 procent sand/bentonit kunde levande bakterier med få undantag enbart påvisas vid fuktkvoter som översteg 15 procent /Stroes-Gascoyne et al, 1997/. Detta motsvarar en fuktkvot på ca 30 procent i en ren bentonitbuffert med avseende på vattentillgången för bakterier. Förklaringen till den dåliga överlevnaden är att när bentonitmaterialiet i bufferten sväller, tas vatten upp mellan skikten i montmorilloniten från omgivningen. Bakterier måste då konkurrera med montmorilloniten om tillgängligt vatten vilket kan medföra en uttorkning av

bakteriecellen som kan vara dödlig /Motamedi et al, 1996/. Bakteriernas cellmembran är helt permeabelt för vatten vilket innebär att bakterierna måste kompensera uttorkning genom att pumpa in joner från utsidan så att det osmotiska trycket blir lika innanför och utanför cellmembranet. En annan strategi är att bakterierna tillverkar polyalkoholer, eller andra osmotiskt aktiva organiska molekyler. För att göra detta krävs energi och tillgång på salter, men tillgången på energi, t ex nedbrytbart organiskt material, är begränsad i bentonit. Det kan innebära att även om en bakterie aktivt skulle kunna kompensera en sjunkande vattenaktivitet, så finns inte möjligheten i en kompakterad buffert. En hög buffertdensitet kan således förhindra bakterietillväxt och resultera i avdödning av vissa mikrobgrupper. Torkresistenta bakterier kan överleva i inaktiv form. Pågående laboratorieexperiment indikerar att sulfatreducerande bakterier bara överlever i svällande bentonit om de befinner sig i så kallad sporform. En bakteriespor är en torkresistent överlevnadsform som är inaktiv och den bildar då inte sulfid eller gas. I sammanfattning bedöms inte bakterier kunna överleva i en vattenmättad buffert med en densitet över 1800 kg/m<sup>3</sup> /Pedersen et al, 1995/.

Bakterier varierar i storlek från 0,2–600 µm och de har ingen möjlighet att förflytta sig i en buffert eftersom utrymmet mellan lerskikten är av storleksordningen 0,002 µm. Bakteriell radionuklidtransport bör därmed kunna uteslutas i en fungerande buffert.

I återfyllningsmaterialet ökar möjligheterna till bakteriell aktivitet med minskande densitet och ökande vattentillgång. Många bakterier konsumerar syre under sin förbränning av organiskt material, metan, järn(II) och svavel. En bakteriell aktivitet i återfyllningen kan därför vara fördelaktig eftersom den kommer att utgöra ett betydande bidrag till önskvärd syrereduktion där.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Ett fullskaleexperiment med en uppvärmd kapsel och 50/50 procent bentonit/sand utfördes i AECL's underjordiska laboratorium i Kanada. Man fann med få undantag bara levande bakterier i bentonit med en fukthalt överstigande 15 procent, vilket ungefär motsvarar tillgängligheten för vatten i en svensk buffert med densiteten 2000 kg/m<sup>3</sup> /Pedersen och Karlsson, 1995/. Förhöjd temperatur hade ingen inverkan på bakterieförekomsten. Slutsatsen blev att uttorkning drabbat bakterierna i de delar av bufferten som hade en vattenkvot som understeg 15 procent.

I laboratorieexperiment gjordes en uppföljning av det Kanadensiska experimentet. Två arter av sulfatreducerande (sulfidbildare) bakterier exponerades för MX-80 bentonit med olika densitet. Överlevnad kunde påvisas upp till 1800 kg/m<sup>3</sup> men inget liv kunde återfinnas vid 2000 kg/m<sup>3</sup> /Motamedi et al, 1996/.

Ytterligare experiment pågår och planeras för att undersöka sannolikheten för att bakterier kan överleva och vara aktiva i kompakterad bentonit. Arbetshypotesen är för närvarande att denna sannolikhet är mycket låg.

### **Tidsperspektiv**

Eventuella bakteriella processer i buffert och återfyllning bör starta tämligen omgående, efter det att grundvatten når buffert och återfyllning. Möjligen kan bakteriell aktivitet, åtminstone i återfyllnaden, vara som störst direkt efter återfyllningen, för att sedan avklinga efterhand som organiskt material och syre i återfyllnaden förbrukas.

### Naturliga analogier

Det finns en naturlig analog i Dunarobba, Italien, där ett bentonitskred begravt en skog för cirka en och halv miljon år sedan. Man kan fortfarande hitta trä som inte brutits ned av mikroorganismer. Det tyder på att förhållandena för mikrobiell aktivitet i bentonit-lera är ogynnsamma.

### Sammanfattning av osäkerheter

Det finns många miljoner olika arter av bakterier och minst hundra olika sulfat-reducerande bakterier. Det är inte möjligt att testa arbetshypotesen (att bakterien inte kan existera och vara aktiv i högkompakterad bentonit) på alla dessa arter. Istället inriktas arbetet på att undersöka representanter för olika grupper med olika krav på vatten, temperatur och näring. Arbetshypotesen har nyligen testats med 10 olika arter under LOT-försöket på Äspö och laboratorieförsök har inletts där överlevnad och aktivitet av dessa 10 bakterier ska studeras. Slutligen kommer försök att göras med bakterier och deras aktivitet under fältexperimenten med återfyllning och prototypförvar på Äspö.

### Hantering i säkerhetsanalysen

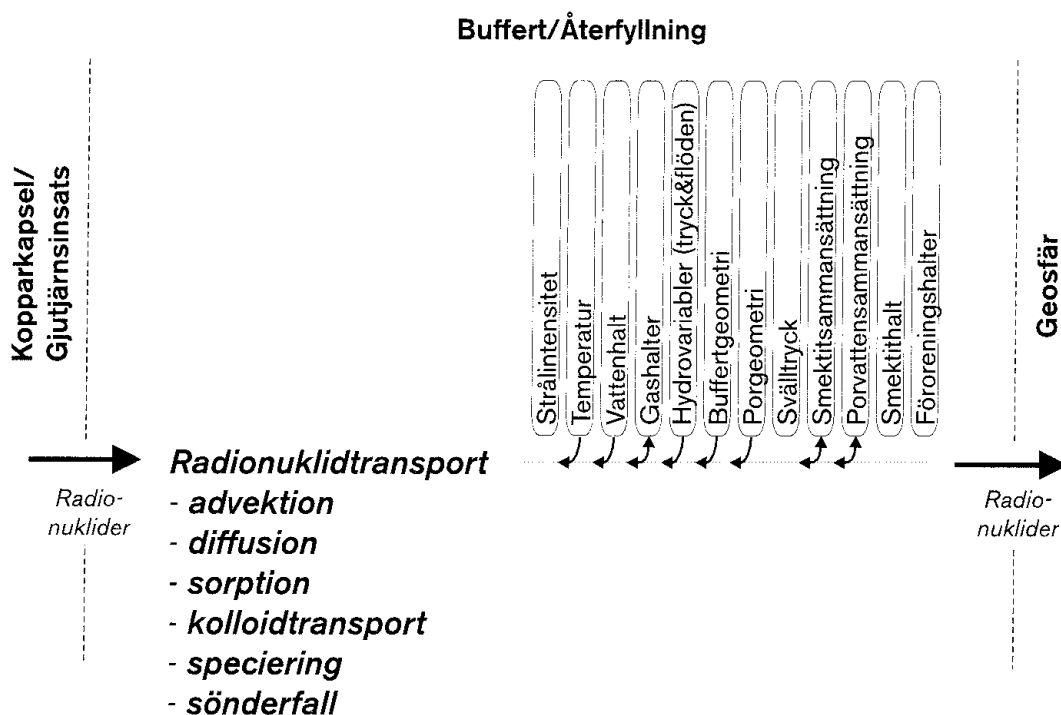
**Basscenario:** Bakteriella processer försummas förutsatt att densiteten inte understiger 1 800 kg/m<sup>3</sup>.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

## 4.8 Radionuklidtransport



Figur 4-24. Radionuklidtransport i buffert/återfyllning.



### 4.8.1 Överblick

Efter vattenmättnad förväntas *radionuklidtransport* i bufferten ske uteslutande genom *diffusion* i buffertens porer, möjligen också på lerpartiklarnas ytor. Varken *advektion* eller *kolloidtransport* förekommer på grund av buffertens egenskaper. Radionuklider kan *sorberas* till montmorillonitens ytor. Avgörande för detta är radionuklidens kemiska form som bestäms av den kemiska miljön i bufferten genom processen *speciering*. Det *radioaktiva sönderfallet* bestämmer tillsammans med transportförhållandena i vilken utsträckning radionuklider från en trasig kapsel hinner sönderfalla innan de når buffertens yttre gräns.

### 4.8.2 Advektion

På grund av buffertmaterialets låga hydrauliska konduktivitet, förväntas all transport av lösta ämnen i buffert efter vattenmättnad ske genom diffusion, se avsnitt 4.5.2.

Återfyllningen har en hydraulisk konduktivitet respektive diffusivitet som ligger i ett område där både diffusion och advektion kan vara viktiga transportmekanismer. Beräkningar visar dock att även med ett mycket högt flöde genom återfyllningen blir uttransporten av radionuklider högst en faktor 2 större än i fallet med endast diffusion /Moreno, 1999/.

### 4.8.3 Kolloidtransport

#### **Allmän beskrivning**

Partiklar med dimensioner i storleksordningen  $10^{-9}$ – $10^{-6}$  m (kolloider) skulle kunna bildas vid upplösningen av bränslet. Den diffusiva transporten av radionuklider med kolloider genom högkompakterad bentonit antas dock vara försumbar, beroende på bentonitporernas slingrighet och ringa storlek. Experiment med 15 nm guldkolloider visar att mikrostrukturen i en bentonit med en torr densitet av  $1\ 000\ \text{kg/m}^3$  effektivt filtrerar kolloider /Kurosawa et al, 1997/.

#### **Modellstudier/experimentella studier**

I diffusionstester med stora organiska molekyler i bentonit kunde ingen transport detekteras. Däremot har inga direkta mätningar av bentonitens förmåga att filtrera kolloider genomförts.

#### **Tidsperspektiv**

#### **Naturliga analogier**

#### **Sammanfattning av osäkerheter**

#### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Ej relevant.

**Kapseldefektscenario:** Förekommer inte, förutsatt att bufferten helt omger kapseln och minst har densiteten  $1000\ \text{kg/m}^3$ .

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador, se kapseldefektscenariot, annars basscenariot.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador, se kapseldefektscenariot, annars basscenariot.

#### **4.8.4 Speciering av radionuklider**

##### **Allmän beskrivning**

Specieringen av radionukliderna har betydelse för sorptionen och diffusionen i bufferten. Den påverkas av vilken speciering nukliden hade vid randen till bufferten, dvs inuti kapseln (se avsnitt bränsle/hålrum), men också av de kemiska förhållandena i bufferten.

##### **Modellstudier/experimentella studier**

Om vattenkemin i bufferten är känd, kan specieringen av radionuklider beräknas med en termodynamisk jämviktsmodell, t ex EQ3/6.

##### **Tidsperspektiv**

Alla

##### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

##### **Sammanfattning av osäkerheter**

Samma gäller som för speciering i bränsle/hålrum, se avsnitt 2.7.8.

Hantering i säkerhetsanalysen

**Basscenario:** Inte relevant.

**Kapseldefektscenario:** De data som används för diffusion och sorption är baserade på en (eller flera) antagen (antagna) speciering(ar) beräknade för de vattensammansättningar som kan förekomma i bufferten.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador, se kapseldefektscenariot, annars basscenariot. Eventuella förändringar i porvattensammansättning påverkar specieringen, vilken i sin tur påverkar diffusion och sorption.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador, se kapseldefektscenariot, annars basscenariot.

#### **4.8.5 Sorption**

##### **Allmän beskrivning**

Texten under denna rubrik är baserad på /Yu och Neretnieks, 1997/.

Ytan på smektitiska leror har en permanent negativ laddning, se avsnitt 4.7.4. Obalansen i laddning neutraliseras av utbytbara katjoner mellan flaken. När leran är vattenmättad, hydratiseras de utbytbara katjonerna och ett elektriskt dubbellager bildas i vatten/lergränsskiktet.



De laddningskompenserande katjonerna är lätt utbytbara, och kan ersättas av andra katjoner i den lösning som är i kontakt med lerytan. Sorptionen av katjoner i smektit-mineral kan beskrivas som jonbytesreaktioner och kan modelleras med termodynamiska jämviktskonstanter eller selektivitetskoefficienter. Jonbyte är den typiska sorptionsmekanismen för alkali-, alkaliska jordarts- och många övergångsmetaller.

Radionuklider kan också sorberas genom reaktioner med ytans funktionella grupper. Ytans funktionella grupper är kemiskt reaktiva molekyllära enheter placerade så att de kan nås av molekyler i lösning. Eftersom de funktionella grupperna är låsta i det fasta materialet, är deras reaktivitet beroende på reaktionsstadiet hos de närmaste grupperna. När en funktionell grupp reagerar med en molekyl från lösningen och bildar en stabil enhet, har ett yt-komplex bildats och sorptionsmekanismen kallas yt-komplexering. De flesta aktinider och lantanoider bildar yt-komplex. Nuklider sorberade som yt-komplex kan inte transporteras med ytdiffusion, se avsnitt 4.8.6.

**Inverkan av porvattensammansättning:** Sorptionen av katjoner genom jonbyte påverkas av koncentrationen av konkurrerande joner i lösning – sorptionen av strontium är t ex starkt beroende på kalciumkoncentrationen, eftersom selektiviteten är högre för kalcium. Upplösningen av accessoriska mineral i bentoniten kan höja jonstyrkan och på så sätt minska sorptionen av radionuklider i katjonform.

**Inverkan av densitet:** Sorptionen påverkas också av densiteten,  $K_d$  för cesium halveras t ex vid en ändring av densiteten hos det vattenmättade systemet från 1300 till 1950 kg/m<sup>3</sup>.

**Inverkan av temperatur:** De flesta experiment har genomförts vid rumstemperatur. En ökning eller minskning av temperaturen har betydelse för sorptionen, men effekten i det temperaturintervall som kan förväntas i förvaret bedöms med god marginal täckas in av andra osäkerheter.

### **Modellstudier/experimentella studier**

I studier av radionuklidtransport från ett förvar beskrivs sorptionsjämvikten normalt som ett linjärt samband mellan den sorberade koncentrationen och koncentrationen i lösning, karakteriserad med en distributionskoefficient  $K_d$ , som definieras

$$K_d = \frac{q}{C_w}$$

där  $q$  är den sorberade koncentrationen som massa per viktenhet fast fas och  $C_w$  koncentrationen i lösning. När koncentrationen av specien i lösning är låg, vilket normalt är fallet för radionuklider, ger den linjära approximationen ett tillfredsställande resultat. Det finns dock andra samband som kan tillämpas vid högre koncentrationer, t ex Freundlich och Langmuir isothermerna eller jonbytesmodeller.

Yt-komplexeringsmodeller med parametrar från väl kontrollerade försök skulle kunna användas för att bättre beskriva sorptionens beroende på yttre parametrar som pH etc.

### **Tidsperspektiv**

Sorption i bufferten är en viktig process för många radionuklider. De tidsskalor som är intressanta är beroende på den individuella nuklidens halveringstid. Om transporttiden genom bufferten är av samma storleksordning eller längre, har sorptionen stor betydelse för frigörelsen. I annat fall är betydelsen underordnad.

## **Naturliga analogier**

Inte relevant.

## **Sammanfattning av osäkerheter**

Distributionskoefficient  $K_d$  är ett uppmätt värde som bara gäller för de förhållanden som det aktuella värdet mättes under, och det kan egentligen inte extrapoleras till andra förhållanden. Fallet med sorption i högkompakterad bentonit är särskilt komplicerat eftersom så gott som allt vatten är interlamellärt och det kan vara svårt att definiera kemin. Detta gör att resultaten från sorptionsmätningar i batch-försök inte går att tillämpa.

I /Yu och Neretnieks, 1997/ ges värden för den apparenta diffusiviteten,  $D_a$ , som är den parameter som egentligen har betydelse för retardationen av radionuklider och den effektiva diffusiviteten,  $D_e$ , som styr transportkapaciteten genom bufferten, se 4.8.6.

## **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Jonbytesmodeller kan användas för beräkning av omvandling från Na-smektit till Ca-smektit, se avsnitt 4.7.4.

**Kapseldefektscenario:** Sorptionen beräknas med modellen COMP23 och data hämtas från /Yu och Neretnieks, 1997/. I den rapporten finns både realistiska och pessimistiska datauppsättningar för salt och sött vatten.

För återfyllningen beräknas sorptionskoefficienterna för radionukliderna för en 15-85 blandning för samtliga platser, se Andersson /1999/. Ingen hänsyn tas i SR 97 till att återfyllningen kan behöva göras platspecifik för att uppfylla ställda krav.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador, se kapseldefektscenariot, annars basscenariot. Eventuella förändringar i porvattensammansättning påverkar specieringen, vilken i sin tur påverkar sorptionen.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador, se kapseldefektscenariot, annars basscenariot.

## **4.8.6 Diffusion**

### **Allmän beskrivning**

Hela diskussionen om denna process gäller förutom radionuklider också andra lösta ämnen som transporteras i bufferten (kapselkorrodanter, kalium och kalcium som kan påverka bentoniten etc).

På grund av buffertmaterialets låga hydrauliska konduktivitet kommer transport av lösta ämnen att domineras av diffusion, se avsnitt 4.5.2. Diffusionmekanismer för radionuklider tillsammans med utvalda diffusionsdata finns utförligt beskrivet i /Yu och Neretnieks, 1997/. Följande text bygger på den framställningen.

Diffusionen i ett poröst medium sker enligt Fick's första lag:

$$J = -D_p \varepsilon \frac{dC_p}{dx},$$

där  $J$  är det diffusiva flödet per ytenhet,  $D_p$  diffusionskoefficienten i porlösningen,  $\epsilon$  är porositeten och  $C_p$  koncentrationen av den diffunderande specien.

Diffusionskoefficienten i porlösningen är lägre än diffusionskoefficienten i en fri volym av samma lösning,  $D_w$ . Detta beror på porernas slingrighet, vilket ökar längden på diffusionsvägen och på att det kan finnas volym av samma "återvändsgränder" i vissa porer. Relationen mellan  $D_p$  och  $D_w$  är:

$$D_p = D_w \frac{\delta}{\tau^2}$$

där  $\delta$  är konstruktiviteten (återvändsgränderna) och  $\tau$  tortuositeten (slingrigheten) i porerna.

För sorberande species finns experimentella indikationer på ytterligare en diffusionsmekanism, vilken brukar benämnas ytdiffusion. Anledningen till ytdiffusion kan vara att katjoner, sorberade i jonbytesposition, hydratiseras i den vattenmättade leran och kan byta plats genom diffusion. De är dock bundna till närhet till montmorillonitytan och på det sättet sorberade med jonbyte.

Fick's andra lag, diffusionsekvationen, beskriver förändringar i koncentrationen av en diffunderande specie i tid och rum. För diffusion av en sorberande specie i ett poröst material kan den formuleras:

$$\epsilon \frac{\partial C_p}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial t} = \epsilon D_p \frac{\partial^2 C_p}{\partial x^2} + \rho D_s \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}$$

Där  $\rho$  är materialets bulkdensitet och  $D_s$  ytdiffusionskoefficienten. Om man antar linjär sorption kan ekvationen skrivas:

$$\frac{\partial C_p}{\partial t} = \frac{D_e}{\epsilon + K_d \rho} \frac{\partial^2 C_p}{\partial x^2} = D_a \frac{\partial^2 C_p}{\partial x^2}$$

där  $K_d$  är distributionskoefficient,  $D_e$  är den effektiva och  $D_a$  den apparenta diffusionskonstanten vilka definieras

$$D_e = \epsilon D_p + K_d \rho D_s$$

$$D_a = \frac{D_e}{\epsilon + K_d \rho}$$

Med antagandet om linjär sorptionsisoterm kan  $C_p$  ersättas med totalkoncentrationen i det porösa materialet genom att multiplicera med  $\epsilon + K_d \rho$  i den tidigare ekvationen, vilket ger:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_a \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

där  $C$  är totalkoncentrationen. Detta är den ekvation som normalt används för diffusionsstudier av radionuklider i bentonit. För diffusion av icke-sorberande specier gäller att  $D_a$  är lika med  $D_e / \epsilon$ .

**Ytdiffusion:** I flera experiment har det observerats att den apparenta diffusionskoefficienten ( $D_a$ ) för katjoner och deras respektive distributionskoefficient ( $K_d$ ) inte stämt överens.  $D_a$  har varit högre än vad som förväntas från  $K_d$  och traditionell diffusions-sorptionsteori. Två förklaringar till fenomenet har föreslagits: ytdiffusion eller minskning av  $K_d$  i högkompakterad bentonit jämfört med batch-experiment (lösa geler eller suspensioner).

Ytdiffusion kan förklaras med katjondiffusion i det elektriska dubbellagret, se avsnitt 4.8.5. Frånvaron av anjoner i dubbellagret gör det möjligt för katjoner att röra sig relativt fritt. De sorberade specierna får alltså en alternativ transportväg med mycket högre gradienter även om diffusionskoefficienten kan vara lägre än i porerna.

Flera studier stöder teorin om ytdiffusion, men fenomenet är fortfarande ifrågasatt. Det är dock klarlagt att vissa katjoner kan ha höga diffusiviteter (transporteras effektivt), vilket måste beaktas i säkerhetsanalyser. Det gäller framför allt elementen Cs, Sr och Ra.

**Inverkan av sorption:** Alternativa förklaringar till de oväntat höga diffusionskoefficienterna för vissa katjoner kan vara att alla ytorna i högkompakterad bentonit inte är tillgängliga för sorption, vilket gör att  $K_d$  minskar, eller att den verkliga jonstyrkan i den kompakterade bentoniten är högre än i försök med lösa bentonit-geler, vilket också påverkar sorptionen.

**Inverkan av densitet:** Transporten av radionuklider i bentonit påverkas av materialets densitet (kompakteringsgraden). Om detta beror på variation i porositet eller ändrad sorption är inte klarlagt. I de flesta experiment minskar dock den apparenta diffusiviteten med ökande densitet.

**Anjonexklusion:** När bentonit har så hög densitet att de elektriska dubbellagren mellan två plan överlagras uppträder ett fenomen kallat anjonexklusion. Anjoner kan inte tränga in i de interlamellära porerna på grund av de elektrostatiska krafterna mellan de negativt laddade ytorna och anjonen. Anjonexklusion minskar avsevärt den tillgängliga porositeten för diffusion. Vid höga salthalter blir effekten av anjonexklusion mindre och i sand-bentonitblandningar är den försumbar. Den säkerhetsmässiga betydelsen av anjonexklusion är mycket stor – det är en av de få processer som begränsar transporten av anjoner från en skadad kapseln.

**Betydelsen av montmorillonitsammansättning:** Det interlamellära utrymmet är beroende på vilken jon som sitter i jonbytespositionerna. Kalcium kommer med tiden att ersätta det natrium som ursprungligen fanns i jonbytesposition. Detta kommer att medföra att utrymmet och diffusiviteten ökar.

**Betydelsen av speciering:** Olika species av samma element kan ha radikalt olika diffusiviteter. Som tidigare nämnts, har anjoniska species lägre diffusivitet än katjoner, men det finns även andra exempel: strontium har lägre diffusivitet vid höga pH än vid neutrala, vilket kan förklaras med formeringen av det neutrala komplexet  $\text{SrCO}_3$ .

### **Modellstudier/experimentella studier**

I litteraturen finns ett stort antal undersökningar beskrivna som rör diffusionsförsök i bentonit och liknande leror. Det är viktigt att observera vilken teknik som har använts och hur diffusiviteterna har bestämts. Om tex metallfilter har använts kan dessa ha stor betydelse för resultaten. I Yu och Neretnieks, 1997/ finns en detaljerad diskussion om olika experimentella metoder och hur resultaten kan tolkas.

### **Tidsperspektiv**

Diffusionsprocesser i buffertmaterialet är av högsta betydelse i alla tidsperspektiv. Om kapseln är hel har processen betydelse för kapselns och buffertens stabilitet. I händelse av en defekt kapsel är diffusionen mycket viktig för att fördröja, minska och i många fall helt förhindra utsläpp av radionuklider.

### **Naturliga analogier**

Nyttan av naturliga analogier för att bestämma diffusionskonstanter är begränsad på grund av problemen med att fastställa de förhållanden som rått historiskt.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Det finns brister i förståelsen av diffusionsförlopp i kompakterad bentonit. De data som används i säkerhetsanalysen är normalt hämtade direkt från experimentella observationer. På så sätt plagieras experimenten i modelleringen utan att man känner alla underliggande detaljer. I /Ochs, 1997/ finns en granskning och sammanfattning av osäkerheterna runt diffusion och sorption i bentonit.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Diffusionsmodeller används för att beräkna kapselkorrosion och utvecklingen av den kemiska miljön i närområdet, främst påverkan på/från buffertmaterialet.

**Kapseldefektscenario:** Diffusion är en av de viktigaste processerna när det gäller att bestämma frigörelsen av radionuklider från en skadad kapsel. Den diffusiva transporten beräknas med modellen COMP23 och data hämtas från /Yu och Neretnieks, 1997/. I rapporten finns både realistiska och pessimistiska datauppsättningar för såväl salt som sött vatten.

**Klimatförändringar:** Om utvecklingen leder till kapselskador, se kapseldefektscenariot, annars basscenariot. Eventuella förändringar i porvattensammansättning kan påverka sorption och anjonexklusion och därigenom diffusionen.

**Jordskalv:** Om utvecklingen leder till kapselskador, se kapseldefektscenariot, annars basscenariot.

### **4.8.7 Sönderfall**

Se sönderfall i bränsle/hållrum, avsnitt 2.3.1. I säkerhetsanalysen hanteras sönderfall av radionuklider i bufferten med de modeller som används för att beräkna radionuklidtransport i närområdet.

## 4.9 Referenser

- Aagard P, Helgeson H C, 1983.** Activity/composition relations among silicates in aqueous solution II. *Clay and Clay Minerals* 31, 207.
- Abercrombie H J, Hutcheon I E, Bloch J D, de Caritat P, 1994.** Silica activity and the smectite-to-illite reaction. *Geology*, v. 22, p 539–542.
- Alonso E, Alcoverro J, 1997.** CATSIUS CLAY – Calculation and testing of behaviour of unsaturated clay as barrier in radioactive waste repositories (Stage 1: Verification Exercises). EC Internal Report.
- Bjurström H, 1997.** Värmeöverföring i en spalt. SKB AR D-97-07, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Boles J R, Franks S G, 1979.** Clay diagenesis in wilcox sandstones of southwest Texas: Implication of smectite diagenesis on sandstone cementation. *J. Sediment Petrol* 49:55–70.
- Bond A, Hoch A, Jones G, Tomczyk A, Wiggin R, Worraker W, 1997.** Assessment studies for a copper canister with cast steel inner component. SKB TR 97-19, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Brusewitz A-M, 1986.** Chemical and physical properties of paleozoic bentonites from Kinnekulle, Sweden. *Clays and Clay Mineralogy* 34:442–454.
- Burst J F Jr, 1959.** Diagenesis of Gulf Coast clayey sediments and its possible reaction to petroleum migration. *AAPG Bull.* 68:73–93.
- Bäckblom G, 1996.** Preliminär utformning av djupförvarets närområde. Djupförvar, SKB AR D-96-011. Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Börgesson L, 1986.** Model shear tests of canisters with smectite clay envelopes in deposition holes. SKB TR 86-26, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Börgesson L, 1989.** Interim report on the settlement test in Stripa. SKB TR 89-29, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Börgesson L, 1992.** Interaction between rock, bentonite buffer and canister. FEM calculations of some mechanical effects on the canister in different disposal concepts. SKB TR 92-30, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Börgesson L, 1993a.** Interim report II on the pilot settlement test in Stripa. SKB TR 93-09, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Börgesson L, 1993a.** Study of the mechanical function of the buffer in the concept with two canisters in a KBS3 deposition hole. SKB AR 93-13, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Börgesson L, Fredrikson A, Johannesson L-E, 1994.** Heat conductivity of buffer materials. SKB TR 94-29, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Börgesson L, Hernelind J, 1995.** DECOVALEX 1 – Test Case 3: Calculation of the Big Ben Experiment – Coupled modelling of the thermal, mechanical and hydraulic behaviour of water-unsaturated buffer material in a simulated deposition hole. SKB TR 95-29, Svensk Kärnbränslehantering AB.

- Börgesson L, Johannesson L-E, 1995.** Thermo-Hydro-Mechanical modelling of water unsaturated buffer material. Status 1995. SKB AR 95-32, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Börgesson L, Johannesson L-E, Sandén T, Hernelind J, 1995.** Modelling of the physical behaviour of water-saturated clay barriers. Laboratory tests, material models and finite element application. SKB TR 95-20, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Börgesson L, Hernelind J, 1997.** THM-modelling of a small scale wetting-heating test on compacted bentonite. CATSIUS CLAY PROJECT. Benchmark 2.2. SKB PR U-97-16, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Claesson J, Probert T, 1996.** Temperature field due to time dependent heat sources in a large rectangular grid. 1- Derivation of analytical solution. SKB TR 96-12, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Colten-Bradley V A, 1987.** Role of pressure in smectite dehydration – Effects on geopressure and smectite-to-illite transformation. AAPG Bull. 71:1414–1427.
- Couture R A, 1985.** Steam rapidly reduces the swelling capacity of bentonite. Nature, Vol 318 (p 50).
- Dixon D A, Gray M N, Graham J, 1996.** Swelling and hydraulic properties of bentonites from Japan, Canada and the USA. Environmental Geotechnics, Kamon (ed), Balkema, Rotterdam.
- Donohew A, Horseman S T, Harrington J F, 1998.** Gas entry into unconfined and initially water-saturated clay pastes between the plastic and liquid limits. Technical Report WE/98/-, Fluid Processes Group, British Geological Survey (under utarbetande).
- Eberl D D, Hower J, 1976.** Kinetics of illite formation: Geol. Soc. Amer. Bull. 87, 1326–1330.
- Elliott W C, Matisoff G, 1996.** Evaluation of kinetic models for the smectite to illite transformation. Clays and Clay Minerals 44: 77-87.
- Fredlund D G, Rahardjo H, 1993.** Soil mechanics for unsaturated soils. John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Fritz B, Kam M, Tardy Y, 1984.** Geochemical simulation of the evolution of granitic rocks and clay minerals submitted to a temperature increase in the vicinity of a repository for spent nuclear fuel. KBS TR 84-10.
- Gunnarsson D, Johannesson L-E, Sandén T, Börgesson L, 1996.** Field test of tunnel backfilling. Äspö Hard Rock Laboratory, SKB PR HRL 96-28, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Harrington J F, Horseman S T, 1997.** Gas transport properties of clays and mudrocks. In: Mudrocks at the Basin Scale, Special Publication, ed A. J. Fleet, Geological Society of London (under tryckning).
- Harrington J F and Horseman S T, 1999.** Gas transport properties of clays and mudrocks. In: Aplin, A. C., Fleet, A. J. and Macquarke, J. H. S. (eds.) Muds and Mudstones: Physical and Fluid Flow Properties, Geological Society, London, Special Publications 158, 107–124.



**Hibbitt, Karlsson and Sorensson.** ABAQUS manuals.

**Horseman S T, Harrington J E, 1997.** Study of gas migration in Mx80 buffer bentonite. Technical Report WE/97/7, Fluid Processes Group, British Geological Survey.

**Hower J, Elsinger E, Hower M E, Perry E A, 1976.** Mechanism of burial metamorphism of argillaceous sediment: 1. Mineralogical and chemical evidence. Geol. Soc. Am. Bull. 87:725–737.

**Huang W-L, Longo J M, Pevear D R, 1993.** An experimentally derived kinetic model for smectite-to-illite conversion and its use as a geothermometer. Clays and Clay Minerals 41, 162–177.

**Hökmark H, 1995.** Smectite-to-illite conversion in bentonite buffers; application of a technique for modeling degradation processes. SKB AR 95-07, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Hökmark H, 1996.** Canister positioning. SKB AR D-96-014, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Jansson M, Eriksen T, 1998.** CHEMLAB – in situ diffusion experiment using radioactiv tracers. Radiochim Acta 82, p 153–156.

**Johannesson L-E, Börgesson L, Sandén T, 1998.** Backfill materials based on crushed rock (part 2). Geotechnical properties determined in laboratory. SKB IPRL-99-23, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Karmland O, Pusch R, Sandén T, 1992.** Electrolytens betydelse för de fysikaliska egenskaperna hos MX-80 bentonit. SKB AR 92-35, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Karmland O, Pusch R, Sandén T, 1994.** Effects of cyclic hydration/dehydration on Na- and K-bentonites. SKB AR 94-40, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Karmland O, 1995.** Salt redistribution and enrichment in compacted bentonite exposed to a thermal gradient – results from laboratory tests. SKB AR 95-31. Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Karmland O, Warfvinge P, Pusch R, 1995.** Smectite-to-illite conversion models. Factors of importance for KBS3 conditions. SKB AR 95-27, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Karmland O, 1997a.** Bentonite swelling pressure in strong NaCl solutions. Correlation between model calculation and experimentally determined data. SKB TR 97-31, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Karmland O, 1997b.** Cement/bentonite interaction. Results from 16 month laboratory tests. SKB TR 97-32, Svensk Kärnbränslehantering AB (under utarbetande).

**Knutsson S, 1983.** On the thermal conductivity and thermal diffusivity of highly compacted bentonite. SKB TR 83-27, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Kurosawa S, Yui M Yoshikawa H, 1997.** Experimental study of colloid filtration by compacted bentonite. In: Scientific Basis for Nuclear Waste Management XX, edited by Gray W and Triay I (MRS symp. proc. 465) pp 963–970.

**Le Bell J C, 1978.** Colloid chemical aspects of the “confined bentonite concept”. KBS TR 97.

**Low P F, 1987.** Structural component of the swelling pressure of clays. *Langmuir*, 3, 18.

**Lynch F L, 1985.** The stoichiometry of the smectite-to-illite reaction in a contact metamorphic environment [M.S. Thesis] Hanover, N.H. Dartmouth College. 93 p.

**Lynch F L, 1997.** Frio shale mineralogy and the stoichiometry of the smectite-to-illite reaction: the most important reaction in clastic sedimentary diagenesis. *Clays and Clay Minerals*, vol. 45, No. 5:618–631.

**Missana T, Turrero M J, Melón A, Adell A, Yllera A, Gutiérrez M G.** Laboratory Experiments: colloid characterisation, colloid generation batch and column experiments i Project Caress 2<sup>nd</sup> Annual Progress Report.

**Moreno L 1999.** Impact of the water flow rate in the tunnel on the release of radionuclides. SKB Report (under utarbetande).

**Motamedi M, Karland O, Pedersen K, 1996.** Survival of sulfate reducing bacteria at different water activities in compacted bentonite. *FEMS Microbiol. Lett.* 141:83–87.

**Müller-Vonmoos M, Kahr G, 1983.** Mineralogische Untersuchungen von Wyoming Bentonit MX-80 und Montigel, Nagra Technischer Bericht 83–12.

**Müller-Vonmoos M, Kahr G, Madsen F T, 1990.** Investigation of Kinnekulle K-bentonite aimed at assessing the long-term stability of bentonites under repository conditions. *Eng. Geol.*, Vol. 28 (pp 269–280).

**Murdoch L C, 1993.** Hydraulic fracturing of soil during laboratory experiments. Part 2. Propagation. *Geotechnique*. 43(2), 267–276.

**Nash P J, Swift B T, Goodfield M, Rodwell W R, 1998.** Modelling gas migration in compacted bentonite. POSIVA 98-08.

**Newman A C D (ed), Brown G, 1987.** The chemical constitution of clays. Mineralogical Society Monograph No.6.

**Norrish K, Quirk J P, 1954.** Crystalline swelling of montmorillonite. *Nature* 173: 255–256.

**Ochs M, 1997.** Review of a report on diffusion and sorption properties of radionuclides in compacted bentonite. SKB R-97-15, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Pedersen K, Albinsson Y, 1991.** Effect of cell number, pH and lanthanide concentration on the sorption of promethium by *Shewanella putrefaciens*. *Radiochim. Acta* 54:91–95.

**Pedersen K, Karlsson F, 1995.** Investigations of subterranean microorganisms – Their importance for performance assessment of radioactive waste disposal. SKB TR 95-10, Svensk Kärnbränslehantering AB.

- Pedersen K, Motamedi M, Karnland O, 1995.** Survival of bacteria in nuclear waste buffer materials. The influence of nutrients, temperature and water activity. SKB TR 95-27, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Perry E A Jr, Hower J, 1970.** Burial diagenesis in Gulf Coast pelitic sediments. *Clays and Clay Minerals*. 18:165–177.
- Philip J R, de Vries D A, 1957.** Moisture movement in porous materials under temperature gradients. *Trans. Amer. Geophys. Union*, vol. 38, no. 2, pp 222–232.
- Pusch R, 1980.** Water uptake, migration and swelling characteristics of unsaturated and saturated highly compacted bentonite. SKBF/KBS TR 80-11. Svensk Kärnbränsleförsörjning.
- Pusch R, 1983a.** Stability of bentonite gels in crystalline rock – Physical aspects. SKBF/KBS TR 83-04. Svensk Kärnbränsleförsörjning.
- Pusch R, 1983b.** Stability of deep-sited minerals in crystalline rock – chemical aspects. SKBF/KBS TR 83-16. Svensk Kärnbränsleförsörjning.
- Pusch R, Börgesson L, 1983.** Buffer Mass Test – Improved models for water uptake and redistribution in the heater holes. Stripa Project Internal Rep. 83-05, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Pusch R, 1985a.** Buffertar av bentonitbaserade material i siloförvaret. SKB AR SFR 85-08, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Pusch R, 1985b.** Final Report of the Buffer Mass Test – Volume III: Chemical and physical stability of the buffer materials. Stripa Project TR 85-14, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Pusch R, Börgesson L, Ramqvist G, 1985a.** Final Report of the Buffert Mass Test – Volume II: Test results. Stripa Project TR 85-12, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Pusch R, Ranhagen L, Nilden K, 1985b.** Gas migration through Mx80 bentonite. Nagra Tech. Rept. NTB-85-36.
- Pusch R, Adey R, 1986.** Settlement of clay-enveloped radioactive canisters. *Applied Clay Science*, Vol.1 (pp 353–365).
- Pusch R, Karnland O, 1988.** Hydrothermal effects on montmorillonite. A preliminary study. SKB TR 88-15, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Pusch R, Karnland O, 1991.** Final Report of the Rock Sealing Project. – Sealing properties of smectitic clay grouts. Stripa Project TR 91-30, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Pusch R, Börgesson L, 1992.** PASS – Project on alternative systems study. Performance assessment of bentonite clay barrier in three repository concepts: VDH, KBS-3 and VLH. SKB TR 92-40, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Pusch R, Karnland O, Lajudie A, Decarreau A, 1993.** MX-80 clay exposed to high temperatures and gamma radiation. SKB TR 93-03, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Pusch R, 1994.** Waste disposal in rock. *Development in geotechnical engineering* 76. Elsevier Publ. Co.

**Pusch R, 1995a.** Selection of buffer materials with special respect to their performance in a long-term perspective. SKB AR 95-21, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Pusch R, 1995b.** Rock mechanics on a geological base. Developments in geotechnical engineering, 77. Elsevier Publishing Co.

**Pusch R, Takase H, Benbow S, 1998.** Chemical processes causing cementation in heat-affected smectite – the Kinnekulle bentonite. SKB TR-98-25, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Pytte A, 1982.** The kinetics of smectite to illite reaction in contact metamorphic shales. M. A. Thesis. Dartmouth College: Hanover, N.H. 78 p.

**Schultz L G, 1969.** Lithium and potassium absorption; Dehydroxylation and structural water content of aluminous smectites. Clays and Clay Minerals 17, 115–149.

**Stroes-Gascoyne S, Pedersen K, Haveman S A, Dekeyser K, Arlinger J, Daumas S, Ekendahl S, Hallbeck L, Hamon, C J, Jahromi N, Delaney T-L, 1997.** Occurrence and identification of microorganisms in compacted clay-based buffer material designed for use in a nuclear fuel waste disposal vault. Can. J. Microbiol. 43:1133–1146.

**Tanai K, Kanno T, Gallé C, 1997.** Experimental study of gas permeabilities and breakthrough pressures in clays. Symposium on the Scientific Basis for Nuclear Waste Management, XX, Boston, Materials Research Society, 1003–1010.

**Thunvik R, Braester C, 1991.** Heat propagation from a radioactive waste repository. SKB 91 reference canister. SKB TR 91-61, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Tissot B, Pelet R, 1971.** Nouvelles donnees sur les mecanismes de genese et de migration du petrole simulation mathematique et application a la prospection. In: 8th World Petroleum Congress, Moscow, Russia. 35–46.

**Velde B, Vasseur G, 1992.** Estimation of the diagenetic smectite illite transformation in time-temperature space. Amer. Mineral. 77, 967–976.

**Wanner H, Wersin P, Sierro N, 1992.** Thermodynamic modelling of bentonite-groundwater interaction and implications for near field chemistry in a repository for spent fuel. SKB TR 92-37, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Weast R (ed), 1973.** Handbook of Chemistry and Physics. CRC Co, Cleveland, Ohio.

**Weaver C E, Pollard L D, 1973.** The chemistry of clay minerals. Elsevier, New York.

**Werme L, 1998.** Konstruktionsförutsättningar för kapsel för använt kärnbränsle. SKB R-98-08, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Wikramaratna R S, Goodfield M, Rodwell W R, Nash P J, Agg P J, 1993.** A preliminary assessment of gas Migration from the copper/steel canister. SKB TR 93-31, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Yu J-W, Neretnieks I, 1997.** Diffusion and sorption properties of radionuclides in compacted bentonite. SKB TR 97-12, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Zysset M, 1992.** Die protoneninduzierte Auflösung von K-Montmorillonit. M. A. Thesis. Universität Bern.

## 5 Geosfären

### 5.1 Beskrivning av geosfären

#### 5.1.1 Allmänt

Djupförvaret ska förläggas i kristallint berg med granitisk sammansättning. Granitisk berggrund består till största delen av mineralen kvarts, fältspater (kalifältspat och plagioklas), glimmermineral (biotit och muskovit) och amfiboler (hornblände). Dessutom finns mindre mängder av sk accessoriska mineral som kan vara av geokemisk betydelse. Exempel på sådana mineral är pyrit, klorit, magnetit, kalcit, dolomit, fluorit, apatit, anhydrit och olika lermineral.

Det kristallina berget karakteriseras också av ett system av sprickor. Frekvens, rumslig fördelning, storleksfördelning, form och orientering hos sprickorna är avgörande för både hydrauliska och mekaniska egenskaper hos berget. Sprickor förekommer i alla skalor från mikroskopiska sprickor i bergmatrisen till sprickzoner, dvs stora stråk med markerat förhöjd spricktäthet i förhållande till det omgivande berget. Sprickzoner utgör ofta dominerande flödesvägar för grundvattnet och storleken är relaterad till storleken hos de bergrörelser som kan förekomma i zonen.

#### 5.1.2 Överblick av variabler

Systemdelen geosfär begränsas inåt av förvarsgeometrin dvs gränsytan mellan geosfär och buffert/återfyllning. Geosfären avgränsas uppåt av biosfären. I övriga riktningar har inte någon tydlig gräns definierats för den delen av geosfären som räknas till förvarssystemet, och som alltså beskrivs i detalj. Som en riktlinje gäller att detaljerade, lokala analyser av t ex grundvattenströmning och värmetransport genomförs i en volym som sträcker sig från förvaret till ytan och lika långt, dvs omkring 500 meter, också i andra riktningar. De delar av geosfären som ligger utanför denna volym benämns avlägsen geosfär och räknas till omgivningen. Var gränsen går tillåts variera efter behov i olika delanalyser.

Geosfären så som den avgränsas av variabeln **förvarsgeometri/rand** karakteriseras av bergmatrisens mineralogiska sammansättning, **matrismineral**, bergets **temperatur** och dess mekaniska **bergspänningar**. Spricksystemets struktur uttrycks av **sprickgeometrin**, sprickytornas och sprickfyllnadernas mineralogiska sammansättning av variabeln **sprickmineral**. Hydrauliskt karakteriseras geosfären av **grundvattenflöden** och **gasflöden** i spricksystemet. **Grundvattensammansättningen** är avgörande för den kemiska utvecklingen som också påverkas av **gassammansättning** och förekomster av **konstruktions- och strömmaterial** i förvaret.

Samtliga variabler är beroende av både tid och rum. Karakteristiskt för geosfären är att flertalet variabler förändras mycket långsamt i tiden men att den rumsliga variationen eller heterogeniteten är stor.

Samtliga variabler definieras i tabell 5-1.

**Tabell 5-1. Variabler i geosfären.**

<b>Förvarsgeometri/rand</b>	Geometrisk beskrivning av deponeringshål, tunnlar, ramper, pluggar, bergförstärkningar med mera.
<b>Temperatur</b>	Temperatur som funktion av tid och rum i geosfären.
<b>Grundvattenflöde</b>	Grundvattenflöde som funktion av tid och rum i geosfärens spricksystem.
<b>Grundvattentryck</b>	Grundvattentryck som funktion av tid och rum i geosfärens spricksystem.
<b>Gasflöde</b>	Gasflöde som funktion av tid och rum i geosfärens spricksystem.
<b>Sprickgeometri</b>	Geosfärens håligheter efter utbyggnad av förvaret och framåt. Alla håligheter räknas in, från sprickzoner till matrisens mikroporer. Hit hör också den borrh- eller sprängstörda zonen (EDZ) och eventuella andra geometriska förändringar av sprickstrukturen som inducerats av utbyggnaden.
<b>Bergspänningar</b>	Bergspänningar som funktion av tid och rum i geosfären.
<b>Matrismineral</b>	Bergmatrisens kemiska sammansättning som funktion av (tid och) rum, dvs en beskrivning av de olika bergarter som förekommer och deras utbredning.
<b>Sprickmineral</b>	Sprickyornas kemiska sammansättning som funktion av (tid och) rum, dvs en beskrivning av de olika sprickmineral som förekommer. Dessutom mängder och sammansättning av sprickfyllnadsmaterial i befintliga sprickor.
<b>Grundvatten-sammansättning</b>	Grundvattnets kemiska sammansättning som funktion av tid och rum i geosfären. I den här variabeln ryms också storheter som Eh och pH, liksom eventuella radionuklider och lösta gaser.
<b>Gassammansättning</b>	Kemisk beskrivning av gaser i geosfärens håligheter, inklusive eventuella radionuklider.
<b>Konstruktions- och strömaterial</b>	Kemisk sammansättning och mängder av injekteringsmedel, bergförstärkningar, pluggar med mera.

## 5.2 Översikt av processer

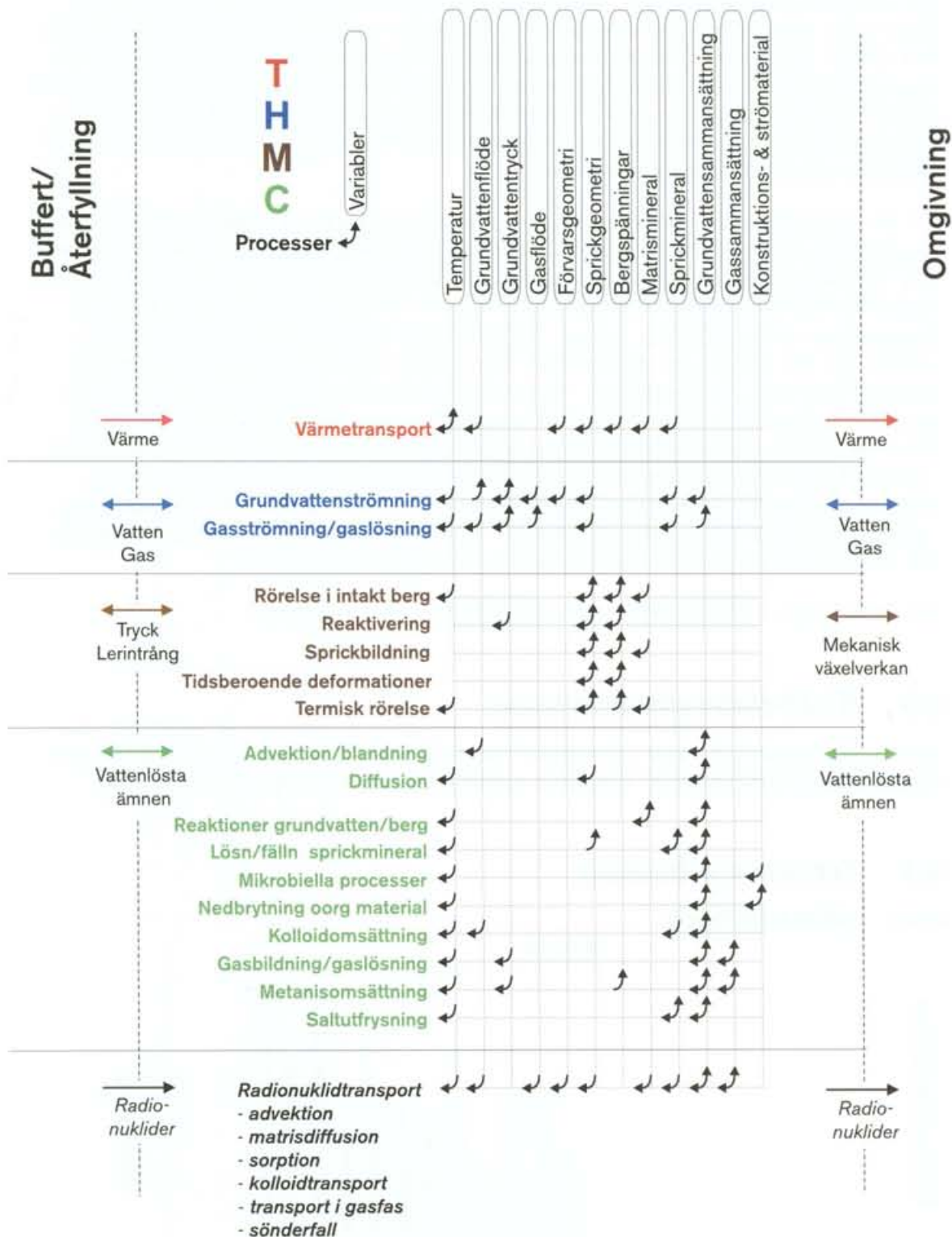
Genom *värmetransport* från bränslet via kapseln och bufferten kommer geosfären att värmas upp.

Genom *grundvattenströmning* omfördelas grundvattnet i geosfärens spricksystem. Även gasströmning kan förekomma.

I geosfären råder initialt ett mekaniskt tillstånd som bestäms av de naturliga bergspänningar och spricksystem på förvarsplatsen samt de förändringar som konstruktionen av förvaret givit upphov till.

Den mekaniska utvecklingen bestäms av hur geosfären svarar på de olika mekaniska laster den utsätts för. Lasterna kan utgöras av den *termiska expansion* som uppvärmningen av förvaret leder till, trycket från svällande buffert/återfyllning, effekter av jordskalv och den storskaliga tektoniska utvecklingen. Förändringarna i geosfären kan förekomma i form av *sprickbildning*, *reaktivering* (plötsliga rörelser i befintliga sprickor), eller *bergkryp* (långsamma omlagringar i berget). Dessutom förekommer *rörelser i intakt berg* dvs kompression/expansion av i övrigt intakta bergblock.

# Geosfär



Figur 5-1. THMC-diagrammet för geosfären. Processer och interaktioner i kursiv stil förekommer endast då kopparkapselns isolering är bruten.



Den kemiska utvecklingen efter förslutning bestäms av en rad transport- och reaktionsprocesser. Den dominerande transportprocessen över långa sträckor är *advektion*, medan *diffusion* spelar stor roll över korta sträckor och i partier där vattnet är stillastående. Vid advektion följer vattenlösta ämnen med det strömmande vattnet, processen leder bland annat till att olika vattentyper från olika partier av geosfären blandas. Reaktionen sker mellan grundvattnet och spricktytor, dessa ger upphov till *lösning/fällning av sprick-mineral*. Dessutom sker mycket långsamma *reaktioner mellan grundvatten och bergmatrisens mineral*. I grundvattnet sker *mikrobiella processer, nedbrytning av oorganiska material* från förvarskonstruktionen, *kolloidbildning* och *gasbildning*. Vid en glaciation kan också *metan- isbildning* och *saltutfrysning* förekomma.

Vid ett eventuellt utsläpp av radionuklider kan dessa transporteras med det strömmande grundvattnet, *advektion*. Även *diffusion* kan vara betydelsefull under stagnanta förhållanden. En viktig aspekt av detta är *matrisdiffusion* dvs att radionuklider diffunderar in i det stagnanta vattnet i bergets mikrosprickor och på så sätt undandras och transporteras långsammare än det flödande vattnet. Avgörande för radionuklidtransporten är även *sorption*, dvs det faktum att radionuklider kan sorbera (fastna) på spricksystemets och bergmatrisens ytor. Matrisdiffusion och sorption är de två viktigaste retentionsprocesserna för radionuklider i geosfären. En annan faktor som kan ha betydelse för retentionen är sorption på *kolloidala partiklar* och transport med dessa. Den kemiska miljön i vattnet bestämmer vilken *speciering* (kemisk form) radionukliderna kommer att ha, vilket är avgörande speciellt för sorptionsfenomenen. Vissa nuklider kan transporteras i *gasfas*. Det *radioaktiva sönderfallet* påverkar innehållet av radionuklider i grundvattnet och måste därför inkluderas i beskrivningen av transportfenomenen.

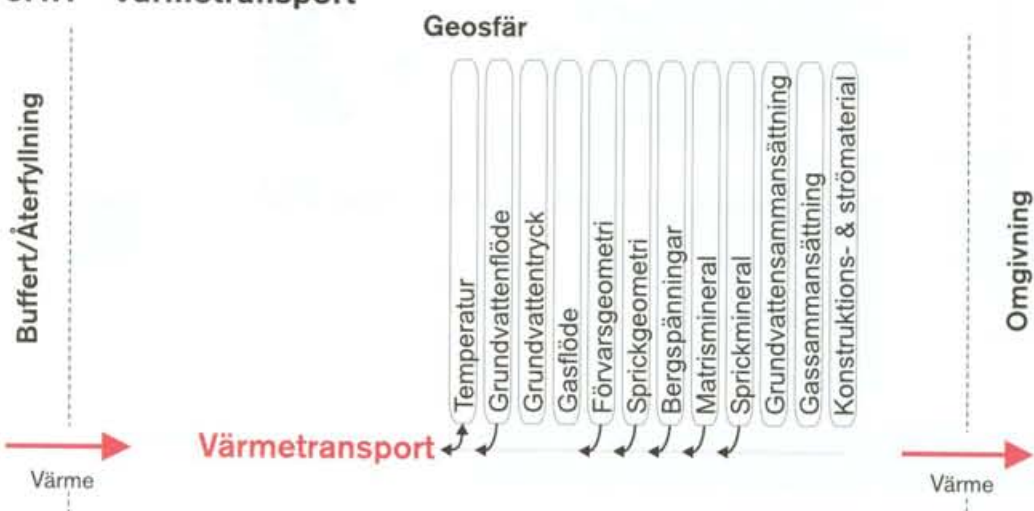
Det fullständiga THMC-diagrammet för geosfären visas i figur 5-1.

### 5.3 Strårelaterade processer

Inga strårelaterade processer i geosfären av betydelse för förvarets säkerhet har identifierats. Radioaktivt sönderfall behandlas under radionuklid transport (avsnitt 5.8).

### 5.4 Termiska processer

#### 5.4.1 Värmetransport



Figur 5-2. Värmetransport.

## Överblick

Värme transporteras i berggrunden huvudsakligen genom värmeledning i det intakta berget. Bergarternas värmeledningsegenskaper och värmelagringsegenskaper, vilka båda ges av mineralens sammansättning, är avgörande för processen. I någon mån kan värme även transporteras genom strömning med grundvattnet. Värmeöverföring från buffert/återfyllning och till omgivningen utgör processens randvillkor.

## Allmän beskrivning

Med värmetransport avses den transport av värmeenergi som sker mellan två punkter av olika temperatur. Värmetransporten kan ske genom ledning, strömning (konvektion) eller strålning. Värme kan också överföras mellan olika faser i samband med kondensation och avdunstning. Vid stationära (tidsberoende) förhållanden är värmetransporten i fasta faser uteslutande bestämt av mediets värmeledningstal (värmekonduktivitet)  $\lambda$ . Vid transienta (tidsberoende) förhållanden inverkar dessutom mediets förmåga att lagra värme, vilken är given av värmekapacitiviteten  $c$  och densiteten  $\rho$ . Allmänt kan temperaturspridning tecknas som en diffusionsprocess med diffusionskonstanten (värmediffusivitet)  $a = \lambda / (c \cdot \rho)$ .

I jordskorpan sker en naturlig värmetransport från djupare varma delar till jordytan, där en avkylning sker genom värmeöverföring till atmosfären och genom strålning. Beroende på bergart kan värme även alstras i ytligare lager genom radioaktivt sönderfall i bergmaterialet. Det geotermiska värmeflödet är stationärt och bestäms därför av bergets värmeledningstal och av den geotermiska gradienten. Den senare ger ett mått på temperaturens variation med djupet. På 500 m djup ligger den geotermiska temperaturen mellan 7 °C och 20 °C i svensk berggrund /Sundberg, 1995/.

De naturliga temperaturförhållandena i berggrunden är även i ett långt tidsperspektiv att betrakta som mycket stabila, framförallt på större djup. Nära markytan sker visserligen en påverkan av klimatet men betydande och uthålliga klimatvariationer krävs för att denna påverkan ska ge effekt på djup i storleksordningen ett antal hundra meter. Exempel på sådana klimatvariationer är glaciationscykler med perioder av permafrost och nedisning.

Värmetransport i geosfären kan likställas med värmetransport i berg. De volymer av annat material som finns i jordlager vid markytan eller i omvandlade sprickzoner, och där principen för värmetransport skiljer sig något från den i berget, är alltför begränsade för att vara av betydelse för den termiska utvecklingen i förvarsberget.

Kristallint berg har allmänt en låg porositet vilket gör att värmetransporten i allt väsentligt sker genom ledning. Konvektion förekommer, men man kan lätt visa att den låga medelporositeten och de små flödes hastigheterna i berget tillsammans innebär att konvektionens bidrag till värmetransporten från förvaret är försumbart /se t ex Thunvik och Braester, 1980/. Dessutom är det pessimistiskt att bortse från detta bidrag.

Värmeproduktionen i djupförvaret kommer att åstadkomma en värmevåg som breder ut sig i alla riktningar från förvaret. Värmeledning i berg är approximativt linjär, varför värmeflödet från förvaret är oberoende av det geotermiska värmeflödet och kommer att överlagra detta. Förloppet är transient och bestäms av den totala effekten i förvaret, av effektfördelningen och av bergets värmediffusivitet. Värmeutvecklingen i förvaret avtar med tiden enligt kända effekt-tid samband /Thunvik och Braester, 1991; Hökmark, 1996/. Efter 100 år har effekten reducerats med cirka 70 procent. Vid ett förvarsdjup av cirka 500 m kommer värmevågen att nå markytan ett par hundra år efter deponering.

**Inverkan av förvarsgeometri:** Förvarsgeometrin har stor betydelse. Temperaturen vid deponeringshålsranden påverkas vid given kapseffekt och givna värmetransportegenskaper av två saker: den initiala effektdensiteten och avvägningen tunnelavstånd/kapselavstånd. Viktigast är effektdensiteten som blir  $7 \text{ W/m}^2$  vid ett tunnelavstånd av 40 m, ett kapselavstånd av 6 m och en kapseffekt vid deponering av 1680 W. Halveras effektdensiteten, t ex genom att kapselavståndet dubblas, blir den maximala temperaturförhöjningen vid deponeringshålsranden i det närmaste halverad. Avvägningen tunnelavstånd/kapselavstånd har mindre betydelse vilket t ex kan visas analytisk som beskrivs nedan under Modellstudier. Om kapslarna, med bibehållen effektdensitet  $7 \text{ W/m}^2$ , istället arrangeras i det kvadratiska mönstret  $15,5 \text{ m} \times 15,5 \text{ m}$ , reduceras t ex maxtemperaturen med omkring  $5 \text{ }^\circ\text{C}$  jämfört med deponering i det rektangulära mönstret  $6 \text{ m} \times 40 \text{ m}$ . På något avstånd från kapslarna är avvägningen tunnelavstånd/kapselavstånd utan betydelse.

**Inverkan av ränderna:** Markytan fungerar som kyld rand och bidrar till att reducera temperaturerna i förvaret. Randen börjar dock inverka först när värmepulsen når markytan, vilket inträffar långt efter det att temperaturen i närheten av kapslarna har börjat sjunka. Den maximala temperaturen i närfältet påverkas därför inte av förhållandena vid markytan.

Bentonitbufferten överför kapseffekten till berget och fungerar därmed som rand för geosfären. Några veckor efter deponering har värmepulsen nått och passerat deponeringshålsranden. Därefter är värmeflödet genom bufferten kvasistationärt, d v s värme överförs till berget i samma takt som det genereras i kapseln. Efter några veckor är därför buffertens och kapselns värmetransportegenskaper utan betydelse för temperaturerna i berget.

Tunnelåterfyllningen har i vattenmättat skick en värmekonduktivitet av  $1,5 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ – $2,5 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$  och reducerar därför något den genomsnittliga värmekonduktiviteten i närfältet. Tunnlarnas volymandel av närfältet är dock så liten att effekten kan försummas. Tunnelåterfyllningens ringa betydelse för värmetransporten illustreras av FEM-beräkningar, gjorda för Prototypförvaret i Äspö HRL /Ageskog och Jansson, 1998/.

**Inverkan av matrisegenskaper:** Matrisammansättning är avgörande för bergets värmekonduktivitet och värmelagringsförmåga. För vanliga svenska bergarter varierar värmekonduktiviteten i intervallet  $2,7$ – $3,6 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$  /Sundberg, 1995/. För kvartsit är konduktiviteten  $6,6 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ . Förvarsbergets effektiva värmekonduktivitet avgörs av proportionerna av de ingående bergarterna, och av deras stokastiska fördelning. För tre finska lokaliseringalternativ har bergmassans effektiva värmekonduktivitet bestämts till  $3,1$  respektive  $2,7$  respektive  $2,7 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$  /Kukkonen och Lindberg, 1995/. Också värmekapacitiviteten och densiteten varierar med bergart. I kapslarnas närområde blir värmeflödet efter en kort tid kvasistationärt vilket innebär att för temperaturen närmast deponeringshålen är värmekonduktiviteten relativt sett viktigare än värmelagringsförmågan, d v s än densiteten och värmekapacitiviteten. I värmetransportberäkningar brukar standardvärdet  $800 \text{ J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$  användas för värmekapacitiviteten. Densiteten varierar vanligen mellan  $2600$  och  $2800 \text{ kg/m}^3$ . För den dominerande bergarten vid Äspö, Äspö diorit, har värmekonduktiviteten bestämts till  $2,8 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$  genom direkt mätning av värmediffusivitet, densitet och värmekapacitivitet /Sundberg och Gabriëlsson, 1998/.

**Inverkan av temperatur:** Temperaturen i sig har en fundamental inverkan på processen eftersom temperaturskillnader mellan olika punkter i rummet utgör själva drivkraften för värmeledningen. Dessutom är värmekonduktiviteten svagt temperaturberoende. Vid en temperaturökning, från 20 °C till 100 °C, minskas värmekonduktiviteten typiskt med cirka 10–15 procent /Kukkonen och Lindberg, 1995/. I området närmast en kapsel kan den maximala temperaturförhöjningen uppgå till 50–60 °C, vilket innebär att värmekonduktiviteten som mest reduceras med cirka 10 procent. På några meters avstånd från deponeringshålen blir reduktionen avsevärt mindre. Den approximation som i allmänhet görs vid temperaturberäkningar, nämligen att bergets värmetransportegenskaper är temperaturoberoende, är därför motiverad.

**Inverkan av sprickgeometri:** Förekomst av sprickor reducerar i princip värmekonduktiviteten, speciellt om sprickorna är fyllda med luft [ $\lambda \approx 0.025 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ ]. Volymandelen luftfyllda sprickor är dock så liten att effekten kan försummas. För vattenfyllda sprickor är  $\lambda = 0,6 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ , vilket innebär att också denna inverkan kan försummas.

**Inverkan av bergspänningar:** Vid ökande spänningar komprimeras sprickor vilket kan öka värmekonduktiviteten marginellt. Effekten är liten och kan försummas.

**Påverkan på ytan:** Värmetransporten har marginell inverkan på de termiska förhållandena på markytan. Tidsintegralen av effektuttrycket ger den värmeenergi som utvecklats under viss tidsperiod. Antar man att man deponerar 4000 kapslar med en initial effekt av 1680 W vardera, finner man att en värmeenergi av cirka 12 TWh utvecklas under de första 1500 åren efter deponeringen. Om denna energi i sin helhet når markytan och överförs till atmosfären under perioden 500–1500 år efter deponeringen, blir den årliga energitillskottet detsamma som från 600 småhus, vardera med årlig bruttoenergiförbrukning av 20 000 kWh.

**Betydelse för den termiska utvecklingen i bränsle, buffert och kapsel:** Vid given kapseffekt och deponeringsgeometri är värmetransporten i berget avgörande för temperaturen på deponeringshålsranden och därmed för temperaturen i bufferten och i kapseln. Detta är den ur säkerhetssynpunkt viktigaste aspekten på processen värmetransport i geosfären.

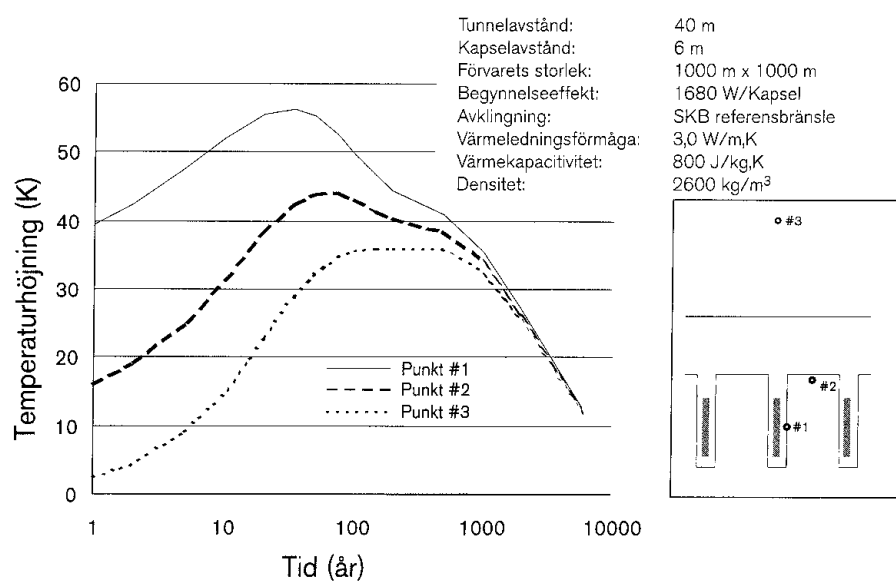
Temperaturen på randen till deponeringshålet kommer att fungera som randvillkor för värmeflödet i bufferten och därmed, tillsammans med buffertens värmetransportegenskaper, kapseffekten och eventuellt förekommande gasfyllda spalter, vara avgörande för temperaturen på kapselytan och i bufferten. För dessa temperaturer har designkriterier ställts upp vilket innebär att man, med kunskap om värmetransportförhållandena i systemet kapsel/buffert, kan specificera en högsta tillåten temperatur vid deponeringshålsranden. Med den analytiska beräkningsmetoden som beskrivs nedan under modellstudier kan temperaturer i närfältet, t ex vid deponeringshålsranden, beräknas för olika antaganden om värmeledningsegenskaperna i berget, deponeringsgeometrin och deponeringssekvensen, varför man också kommer att kunna avgöra för vilka antaganden designkriterierna kommer att uppfyllas.

## Modellstudier

Numeriska temperaturberäkningar med en FEM kod har gjorts av Thunvik och Braester /1991/. Flera numeriska temperaturberäkningar har dessutom gjorts i samband med termomekaniska analyser /se t ex Hakami et al,1998; Hökmark, 1996/.

Claesson och Probert /1996/ utvecklade ett system för att analytiskt beräkna temperaturen i en godtycklig punkt i förvarsberget som funktion av tid efter deponering. Förvaret antas vara utformat som ett eller flera rektangulära områden. Såväl temperaturen på stora avstånd från förvaret som temperaturen i området mellan tunnlar och deponeringshål kan beräknas. Indata till beräkningen är bergets värmetransportegenskaper, kapslarnas effekt vid deponeringstillfället, kapslarnas höjd, effektens avklingning, storleken av det rektangulära området, djupet under markytan och deponeringsgeometrin, dvs tunnelavstånd och kapselavstånd. I den analytiska lösningen förutsätts att berget är homogent och isotropt och att värmetransportegenskaperna är oberoende av temperaturen. Den analytiska lösningen har verifierats genom jämförelse med resultat från numerisk beräkning av bergtemperaturen i närfältet i ett KBS-3 förvar /Hökmark, 1996/. Lösningen har också verifierats genom jämförelse med numeriska beräkningar av temperaturen i fjärrområdet /Israelsson, 1995/. Figur 5-3 visar analytiskt beräknade temperaturer i tre punkter i närfältet.

Den analytiska lösningen, som bygger på superpositionsprincipen, kan också användas för att analysera effekter av att förvaret delas upp i mindre, sinsemellan åtskilda, enheter och effekter av att deponeringen sker i omgångar som fördelas över tiden.



**Figur 5-3.** Temperaturförhöjning i tre punkter i närfältet. Temperaturerna är beräknade med analytisk lösning härledd av Claesson och Probert /1996/. Absoluta temperaturer erhålls genom att addera den geotermiska temperaturen.



## Sammanfattning av osäkerheter

**Osäkerheter i förståelse:** Inga konceptuella osäkerheter finns för processen.

**Osäkerheter i data:** En viss dataosäkerhet finns när det gäller den effektiva värmekonduktiviteten och värmekapacititeten vid de olika förvarsplatserna. Den maximala temperaturförhöjningen vid kapselhålsranden varierar mellan 60 och 50 °C om effektiva värmekonduktiviteten varierar i intervallet 2,7–3,5 W/m,K. Det finns också en osäkerhet om hur deponeringssekvensen i tid och rum påverkar temperaturerna i början av den termiska utvecklingen, dvs under de första årtiondena efter deponering.

## Hantering i säkerhetsanalysen

**Basscenario:** I SR 97 görs temperaturberäkningar för samtliga aktuella platser med platsspecifika förvarsutformningar och termiska data.

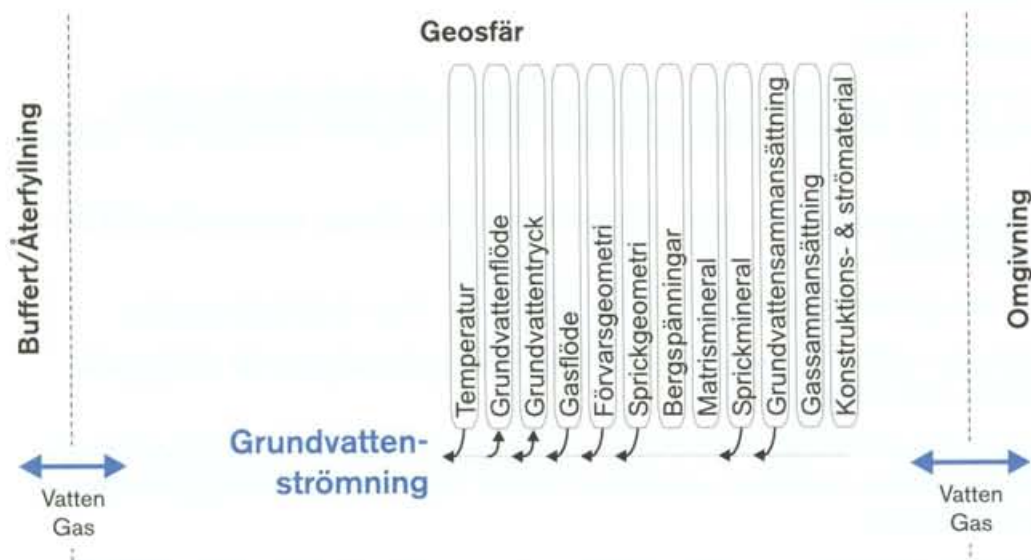
**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatscenario:** Effekter av modifierade randförhållanden diskuteras.

**Jordskalvsscenario:** Se basscenariot.

## 5.5 Hydrauliska processer

### 5.5.1 Grundvattenströmning



Figur 5-4. Grundvattenströmning.

### Överblick

Den drivande kraften för vattenflödet i geosfären utgörs av skillnader i lägesenergi inom geosfären, där lägesenergin i en punkt bestäms av vattentrycket, vattnets densitet och punktens läge i vertikalled.

Vattnets densitet är i huvudsak beroende av temperaturen och vattnets sammansättning, framförallt salthalten.

Om grundvattnet har konstant densitet kan den drivande kraften uttryckas som en gradient av en flödespotential.

Vattenflödets storlek beror dels av drivande kraftens storlek, dels av geosfärens vattenledande förmåga. Den vattenledande förmågan beror av porstrukturens flödesegenskaper och vattnets flödesegenskaper i geosfären. I lösa avlagringar bestäms porstrukturens flödesegenskaper av kornstorleksfördelningen samt kornens form och packning. I kristallint berg bestäms porstrukturens flödesegenskaper av sprickstrukturen.

Flödesegenskaperna beror både av varje sprickas flödesegenskaper och av hur sprickorna är sammankopplade. Sprickornas flödesegenskaper påverkas av den rådande effektivspänningen i geosfären och eventuell gasförekomst i spricksystemet. Vattnets flödesegenskaper styrs av viskositeten, som påverkas av framförallt temperatur och av vattnets kemiska sammansättning. Vattnets flödesegenskaper varierar inom ett relativt litet intervall medan porstrukturens flödesegenskaper uppvisar en mycket stor variationsbredd.

Grundvattenströmningen är av central betydelse i säkerhetsanalysen. Den påverkar den kemiska sammansättningen hos det flödande grundvattnet, och därmed förvarets kemiska miljö. Vid ett eventuellt utsläpp av radionuklider från förvaret utgör det flödande grundvattnet en nödvändig förutsättning för transport av radionuklider från förvaret till biosfären.

## **Allmän beskrivning**

### **Hydrologiska cykeln**

Vattnets kretslopp i naturen brukar vanligen benämnas den hydrologiska cykeln, t ex /Knutsson och Morfeldt, 1995; de Marsily, 1986/. Den delas vanligen in i följande moment:

- Avdunstning från sjöar, hav, mark och växttäcknet samt växters transpiration tillför atmosfären vatten.
- Vattnet transporteras med vindar och ger nederbörd över såväl land som hav.
- Nederbörden infiltrerar genom marken eller rinner på markytan till närliggande vattendrag, sjöar eller hav.
- Den del av det infiltrerade vattnet som inte upptas av växter eller transporteras upp av kapillära krafter, perkolerar (strömmar) vidare ned mot grundvattenytan och bildar grundvatten.
- Grundvattnet förflyttar sig under markytan styrt av rådande hydrauliska drivkrafter och läcker förr eller senare ut i källor eller direkt i vattendrag, sjöar eller hav.

Nederbörden är det som ytterst driver grundvattenflödet medan topografin och geosfärens flödesegenskaper styr flödesmönstret.



## Beräkning av grundvattenflöde

Den vanligaste ansatsen för att beräkna grundvattenflöden i geosfären baseras på Darcys lag som innebär att storleken av flödet per ytenhet ( $q$ ) är proportionellt mot gradienten multiplicerat med geosfärens vattenledande förmåga. Den generella formen av Darcys lag lyder:

$$q = -\frac{k}{\mu} \cdot (\text{grad}(p) + \rho \cdot g \cdot \text{grad}(z)) \quad (5-1)$$

Massflödet ges av

$$\text{div}(\rho \cdot q) + \frac{d(\rho \cdot n)}{dt} = 0 \quad (5-2)$$

Tillståndsekvationerna lyder:

$$\rho = f(T, C, p) \quad (5-3)$$

$$\mu = f(T, C, p) \quad (5-4)$$

Dessa ekvationer är grunden för att beräkna ett vattenflöde med hänsyn tagen till tryck, temperatur och densitetsförhållanden. Permabiliteten ( $k$ ) ges av porsystemets egenskaper och dynamiska viskositeten ( $\mu$ ) bestämmer vätskans egenskaper. Flödesvektorn sammanställs av en tryckgradient ( $\text{grad}(p)$ ) och en gradient som beror av gravitationskrafterna ( $\rho \cdot g \cdot \text{grad}(z)$ ). Densiteten och viskositeten är funktioner av temperatur ( $T$ ), koncentration av lösta ämnen ( $C$ ) samt vattentryck ( $p$ ). Övriga delar i ekvationerna är gravitationskonstanten ( $g$ ), porositet ( $n$ ) samt tid ( $t$ ). Om vattnet har konstant densitet gäller:

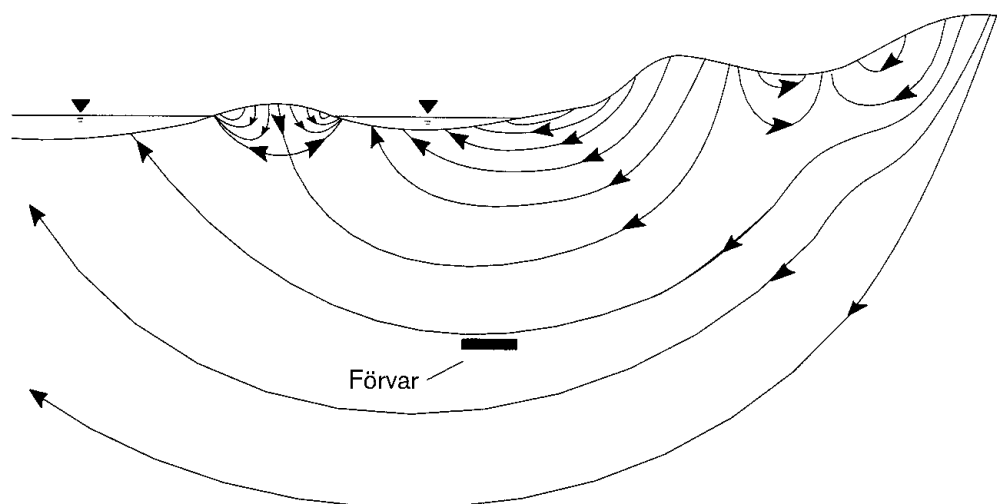
$$q = -\frac{k \cdot \rho \cdot g}{\mu} \cdot \text{grad}\left(\frac{p}{\rho \cdot g} + z\right) = -K \cdot \text{grad}\left(\frac{p}{\rho \cdot g} + z\right) = -K \cdot \text{grad}(h) = K \cdot i \quad (5-5)$$

Den vattenledande förmågan uttrycks i ekvation 5-5 som hydraulisk konduktivitet ( $K$ ); hydrauliska potentialen ( $h$ ) och den hydrauliska gradienten ( $i$ ) blir i detta fall dimensionslösa. Flödet kan inte alltid beräknas med Darcys lag. I kompakta leror vid låga gradienter blir flödet mindre än vad Darcys lag anger om  $K$  är bestämt vid höga gradienter /de Marsily, 1986/. Också vid stora gradienter blir flödet mindre än vad Darcys lag anger eftersom det uppstår friktionsförluster på grund av turbulens /de Marsily, 1986/. I praktiken uppstår turbulenta förluster i stort sett bara nära brunnar som pumpas eller nära borrhål där vatten får flöda fritt in till tunnel.

De drivande krafterna och geosfärens vattenledande förmåga påverkas av en rad faktorer som beskrivs kortfattat nedan.

## Drivande krafter

I Sverige är vanligen grundvattenytans läge nära kopplad till topografin. Orsaken är den relativt rikliga nederbörden och den relativt låga vattengenomsläppligheten i berggrunden. Nära markytan bildas vanligen lokala flödessystem som styrs av topografin, se figur 5-5. I grundvattensammanhang uttrycks den hydrauliska gradienten ibland i procent. Hydrauliska potentialen uttrycks då som meter vattenpelare och gradienten blir dimensionslös, se ekvation 5-5. Under naturliga förhållanden är gradienten vanligen några eller någon tiondels procent nära markytan och vanligtvis minskar och jämnas den ut mot den regionala topografiska gradienten.



*Figur 5-5. Principbild av topografiskt betingade flödesmönster. Normalt minskar såväl gradienten som grundvattenflödet mot djupet. Förekomsten av vattenförande sprickor och sprickzoner kan dock ge ett betydligt mer komplicerat flödesmönster än det som visas i figuren.*

Flödessystem som beskriver samhörande in- och utströmningsområden, förekommer i varierande skalor. Dessa skalor kan för svenska förhållanden vara från hundratals meter till troligtvis hundratals kilometer. Längden och utseendet för en vattenpartikels flödesväg bestäms av topografin, vattnets densitetsfördelning, de vattenförande egenskaperna i bergets spricksystem samt i de lösa jordlagren. In- och utströmning som berör ett djupförvarsområde beror även av det storskaliga flödesmönstret av grundvattnet.

I kustnära områden och på djupare nivåer i inlandet påträffas ofta salta grundvatten, med ökande salthalt mot djupet. En ökad salthalt medför att vattnets densitet ökar, vilket i sin tur påverkar tryckförhållandena. En ökande salthalt mot djupet medför att flödet minskar mot djupet och grundvattnet kan under vissa förhållanden vara mer eller mindre orörligt /Claesson, 1992, de Marsily, 1986/. Förändras randvillkoren vid markytan, t ex vid landhöjning i kustområdena, kan det emellertid även uppstå ett betydande flöde i det djupt liggande salta grundvattnet /Voss och Andersson, 1993/.

En uppvärmning av vattnet medför att vattnets densitet minskar. En lokal uppvärmning av vattnet, t ex från använt bränsle i djupförvaret, kan ge upphov till densitetsförändringar som skapar storskaliga cirkulerande vattenrörelser. /Claesson, 1992, Probert, 1998/. Om den topografiska gradienten ligger på typiska värden för svenska förhållanden får dock denna effekt en begränsad inverkan på flödesmönstret /Thunvik och Braester, 1980/.

Ett strömmande grundvatten påverkar också temperaturfältet genom advektiv transport av värme. På grund av de normalt låga grundvattenflödena styrs emellertid värmeledningen i huvudsak av bergets värmeledande egenskaper och värmetransporten på grund av det strömmande grundvattnet kan försummas, se avsnitt 5.4.1.

Situationer där densitetsvariationer inte kan försummas innebär mer komplicerade modellberäkningar. I dessa fall måste beräkningarna även ta hänsyn till transport av salt och/eller värme.

## Porstrukturens flödesegenskaper

Porstrukturens flödesegenskaper i lösa avlagringar finns väl beskriven i till exempel de Marsily /1986/ och beskrivs inte här.

I kristallint berg bestäms porstrukturens flödesegenskaper av sprickstrukturen. Flödesegenskaperna beror både av varje sprickas flödesegenskaper och av hur sprickorna är sammankopplade. En sprickas flödesegenskaper beror framförallt på dess spricköppning men även dess ytstruktur. Permeabiliteten enligt ekvation 5-1 kan vanligtvis inte direkt erhållas för ett sprickigt medium utan det blir nödvändigt att ansätta approximativa flödesegenskaper i enskilda sprickor eller i bergblock, se avsnittet "Modellstudier/ experimentella studier" nedan.

Berget utanför sprickorna kallas ibland bergmatrisen. I den finns vanligen mikrosprickor med mycket liten spricköppning. Vattenflödet i bergmatrisen är därför vanligtvis mycket lågt med normalt förekommande hydrauliska gradienter. Vattengenomsläppligheten i ett större bergblock bestäms därför i stort sett helt av de öppna och sammanbundna sprickorna inom blocket.

Frekvensen av sprickor, deras rumsliga fördelning, storleksfördelning, form samt orienteringsfördelningar avgör hur hydrauliskt sammanbundna sprickorna är. Uthålliga stråk, formade som mer eller mindre stora skivor och med en markerad förhöjning av spricktätheten i förhållande till sidoberget benämns sprickzoner. Sådana sprickzoner utgör ofta dominerande flödesvägar för grundvattnet. Sprickfyllnader i form av lera kan emellertid medföra att en zon helt eller delvis får en låg vattengenomsläpplighet trots rikligt med sprickor. Sprickzonernas vidd kan variera inom vida gränser, från decimeter storlek till mer än tiotals meter. Vanligen är övergången från "berg" till "sprickzon" diffus eftersom sprickfrekvensen ofta ökar in mot sprickzonen.

För enskilda sprickor och sprickzoner, som båda kan betraktas som tvådimensionella kroppar, anges den vattenledande förmågan av den sk transmissiviteten.

Hydrauliska experiment i fält har visat att sprickor och sprickzoner uppvisar betydande rumsliga variationer i den vattenledande förmågan, dvs systemet är hydrauliskt heterogent. Den vattenledande förmågan kan variera med flera tiopotenser. Variationer inom en viss bergartstyp är i regel större än skillnaderna i bergartstypernas medelvärden. Modellansatser för prediktion/analys av grundvattenflöde (och därigenom även ämnes-transport) måste på ett eller annat sätt ta hänsyn till denna heterogenitet.

Transmissiviteten för en enskild spricka är i stort sett proportionell mot tredje potensen av spricköppningen enligt den sk kubiska lagen. Det innebär att transmissiviteten kan variera flera tiopotenser för en relativt liten förändring i spricköppningen. Den kubiska lagen, som gäller för flöde mellan två parallella skivor, kan dock inte tillämpas direkt på naturliga sprickor. Sprickans ytstruktur gör att vissa delar av sprickan är tät då spricksidorna ligger an mot varandra eller på grund av att sprickan delvis är fylld med ler- och bergfragment. Detta begränsar det tillgängliga utrymmet för flödet jämfört med det idealiserade fallet. Vidare kan spricköppningen variera i den öppna delen av sprickan /National Research Council, 1996, Hakami, 1995/.

I och med att spricköppningen (aperturen) varierar tenderar flödet i en spricka att variera i sprickplanet. Huvuddelen av flödet koncentreras längs vindlande stråk i planet. Det medför att bara en del av sprickans öppna volym tas i anspråk för en stor del av ett flöde som skapas av en konstant gradient. Andras riktningen på gradienten förändras mönstret av de stråk där huvuddelen av flödena äger rum.

Flera faktorer kan påverka sprickans transmissivitet. Ökar den mekaniska lasten (effektivspänningen) på sprickan minskar spricköppningen och andelen av sprickytan som ligger an mot motstående sprickyta ökar. Detta leder till att sprickans transmissivitet minskar. Vid låga effektivspänningar är transmissivitetsförändringen per spänningsförändring som störst. Blir den mekaniska belastningen stor kan befintliga sprickplan förskjutas relativt varandra, berget spricka upp ytterligare längs befintliga sprickplan eller nya sprickor kan skapas. Dessa mekaniska fenomen kan öka eller sänka bergets lokala vattengenomsläpplighet. Uppvärmning eller nedkylning av berget är ytterligare en process som kan orsaka förändringar i spricköppningar och påverka bergets genomsläpplighet.

Ändras vattentrycket i sprickan, t ex för att pumpning startas i ett borrhål i närheten av sprickan, blir hela sprickan aktiverad hydrauliskt så länge tryckförändring pågår. Vattentryckförändringen medför deformation av sprickan och en volymförändring av vattnet i sprickan. Det medför att en viss volym vatten utvinns eller tillförs sprickan beroende på om trycket minskar eller ökar. Det är ett relativt snabbt förlopp på grund av att vattnet och sprickorna har hög kompressibilitet samt att totala sprickporositeten är låg. Volym vatten per volymsenhet av geosfären som avges vid en tryckförändring, då det råder slutna förhållanden, brukar benämnas specifik magasinskoefficient. Är sprickorna öppna mot atmosfären (öppna förhållanden) komprimeras inte sprickorna nämnvärt utan det sker en dränering av sprickorna. Volym vatten per horisontell ytenhet som avges vid grundvattenytan vid en tryckförändring benämns i detta fall vanligen vattenavgivningstal. Vid öppna förhållanden kan det frigöras betydligt mer vatten vid en given tryckförändring jämfört med sprickor djupt nere i berget. Den specifika magasinskoefficienten och vattenavgivningstalet påverkar hur lång tid det tar för grundvattenytan att nå ostörd nivå efter en avsänkning, t ex orsakad av byggandet av ett djupförvar. Tiden påverkas också av bergets genomsläpplighet, porvolym i tunnlar, del av nederbörd som perkolerar samt infiltration från vattendrag, sjöar eller hav.

Sprickytorna är vanligen belagda med olika sprickmineral. Sker utfällningar på sprickytan minskar den öppna spricköppningen och transmissiviteten minskar. Vissa sprickor kan vara mer eller mindre läkta av sprickmineral och är då i stort sett täta. Sker upplösning av sprickmineral ökar transmissiviteten.

### Vattnets flödesegenskaper

Vattnets flödesegenskaper beror av dess viskositet. Viskositeten är framför allt kopplad till temperaturen men även till salthalten. Trycket har mycket liten inverkan på viskositeten /Earlougher, 1977/. Ökad temperatur minskar viskositeten och därmed ökar  $K$ , se ekvation 5-5. Med normala temperaturgradienter i svensk berggrund (dvs cirka 15 grader/km) halveras viskositeten på 2000 m djup jämfört med förväntad viskositet nära markytan. Nära en kapsel kan vattentemperaturen närma sig 100 °C vilket medför att viskositeten blir ca en fjärdedel av viskositeten vid ostörd vattentemperatur på 500 m djup. Om salthalten är några få procent har den endast en mindre påverkan på viskositeten /de Marsily, 1986; Earlougher, 1977/. I allmänhet kan man bortse ifrån temperaturens och salthaltens påverkan på viskositeten.

### **Påverkan av gasflöde**

Mängd och sammansättning hos den gas som alltid finns naturligt i grundvatten varierar. I Sverige består geogaser vanligen till större delen av kväve och helium. Det förväntas också att det kommer att produceras gas i förvaret, avsnitt 4.5.3. Mängden gas som produceras i förvaret förväntas vara låg och påverkar sannolikt inte grundvattenflödet i någon större omfattning.

Gasen kan vara i löst form eller i form av gasbubblor. Löst gas påverkar inte vattnets flödesegenskaper. Sänks vattentrycket i en vattenmassa med löst gas under ett visst tryck bildas gasbubblor i spricksystemet. Det medför att sprickornas vattenledande förmåga minskar där gasbubblorna bildas. Detta kan i huvudsak förväntas ske nära öppna tunnlar (i kontakt med atmosfären) och nära borrhål där det kan ske en kraftig trycksänkning om borrhålet flödas eller pumpas.

Erfarenheterna från flera tunnelundersökningar har visat att den hydrauliska konduktiviteten radiellt mot tunnelns längdutsträckning tycks minska närmast tunnelväggarna när tunnlar är öppna mot atmosfären. Man har sökt förklaringar till detta fenomen i spänningsomlagringar och kemiska utfällningar. En ytterligare förklaring är att konduktivitetsminskningen kan vara ett fasgränsfenomen mellan luft eller annan gas och vatten. Processen beskrivs då av ett tvåfasflödessystem. Kunskap om tvåfasflöde kan vara väsentligt vid utvärdering av hydrauliska fältförsök samt för återmättnadsprocessen för buffert/återfyllning. När djupförvaret försluts kommer återfyllningsmaterial i tunnlar och berget runt tunnlar successivt att vattenmättas. Det medför att vattenledningsförmågan ökar på grund av att gasen löser sig och eventuellt blir vattenledningsförmågan i berget närmast tunnel högre än i omgivande berg på grund av den förhöjda sprickfrekvensen /Emsley et al, 1997; Olsson, 1994; Jarsjö, 1998/.

### **Påverkan av landhöjning**

Den senaste istidens glaciär tryckte ner berggrunden flera hundra meter. Då isen drog sig tillbaka började jordskorpan återta sin ursprungliga form och fortfarande pågår en landhöjning som medför en kustlinjeförskjutning längs större delen av Sveriges kust. Det medför att randvillkoren för grundvattenflödet förändras med tiden i kustnära områden. Då hav förvandlas till land blir vissa av dagens utströmningsområden inströmningsområden under de närmaste tusen åren. Dessa dynamiska randvillkor påverkar det storskaliga flödesmönstret och det uppstår ett visst flöde i det djupt liggande salta grundvattnet /Voss och Andersson, 1993/.

### **Inverkan av klimatförändringar**

I ett långt tidsperspektiv kan betydande klimatförändringar förväntas ske vilket påverkar randvillkoren i grundvattenflödesmodeller. Ur grundvattenflödessynpunkt är förmodligen kommande kalla perioder med växande glaciärer de viktigaste. En övergång till ett kallare klimat förväntas inom 5 000 till 10 000 år i olika delar av Sverige. Genom att definiera olika klimatscenarier kan effekter på grundvattenflödet studeras i beräkningsmodeller. Exempel på scenarier ges nedan; i Boulton et al /1999/ redovisas scenarierna mer utförligt.

Ur hydraulisk synvinkel är det relativt stor skillnad mellan en avancerande glaciär och en glaciär som drar sig tillbaka på grund av smältning. En avancerande glaciär förväntas vara kall, med frusen botten vid den främre delen. Framför glaciären råder permafrost. Bergvolymen som omfattas av permafrost bör uppvisa en betydligt lägre vattenledningsförmåga än i ofruset tillstånd. Permafrosten kan möjligen påverka sprickbildningen och vattenkemin i och nära den frusna bergmassan. Under de inledande tusentals åren av glacial tillväxt bör ovanstående förhållanden råda inom det område där glaciären avancerar. Några kilometer ifrån iskanten smälter undre delen av glaciären och vattentrycket blir högt under isen vilket medför att smältvattnet infiltrerar i berggrunden. Permafrosten framför glaciären och den frusna bergmassan bör medföra att vattnets strömningsvägar från infiltration till utströmningsområden blir relativt långa. Sannolikt avleds en del av det infiltrerade vattnet till jökälvar under isen som mynnar vid iskanten. Dessa jökälvar svarar för bildandet av rullstensåsar. Vidare sjunker grundvattentrycket lokalt invid jökälvarna. Lasten från isen kan orsaka en effektivspänningsökning vilket bör medföra att spricköppningen minskar, åtminstone lokalt.

En glaciär som drar sig tillbaka under avsmältning har sannolikt ingen eller liten permafrost under isens främre del och ingen framför iskanten. Det innebär att det kan uppstå stora gradienter närmast iskanten och flera av de potentiella flödesvägarna från infiltration under isen till utströmningsområdena är kortare än för den avancerande glaciären. Grundvattenflödena i området nära glaciärens kant kan troligen vara stora jämfört med andra tidsperioder. Sannolikt avleds en del av det infiltrerade vattnet i jökälvar under isen som mynnar vid iskanten även i detta fall. Glaciärens framkant kan vara kraftigt uppsprucken och under sådana förhållanden styrs grundvattennivån av topografin i det uppspruckna området. Troligen är också isfrontens lutning större än vid en avancerande glaciär. Det medför att den mekaniska belastningen av isen eventuellt kan skapa förskjutningar i berggrunden och förändra effektivspänningen vilket i sin tur kan förändra vattengenomsläppligheten i berget.

Under glaciationsperioden förändras sannolikt också den globala havsnivån. Djupet i havet och kustlinjeförflyttningen beror av den globala havsnivåförändringen och markytans nedtryckning på grund av framryckande glaciär och efterföljande landhöjning när glaciären drar sig tillbaka. Detta påverkar de potentialskillnader som driver grundvattenflödet.

### **Påverkan av människor**

Framtida mänskliga ingrepp kan ändra randvillkoren och därmed flödesförhållanden på förvarsnivå. Bergborrade brunnar för vattenförsörjning lokaliseras till vattenförande delar av berget, som ibland kan vara större genomsläppliga sprickzoner. Om dessa zoner är hydrauliskt förbundna med flödesystemet runt förvaret kommer uppumpning av grundvatten troligen att ha en inverkan på flödesförhållandena genom förvaret. Liknande ingrepp med kanske ännu större påverkan på flödesförhållanden är djupgående tunnelbyggen eller andra verksamheter som medför ett grundvattenuttag i större omfattning i närheten av ett djupförvar.

Lokala förändringar av grundvattenbildning kan förekomma till följd av till exempel anläggning av dammar, dränering av våtmarker och urbanisering. Påverkan av människor beskrivs utförligare i Morén et al /1998/.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Prediktiv modellering av vattenflöde och transport i sprickigt berg är komplext i jämförelse med i porösa geologiska media. För att beskriva grundvattenflödet i berggrunden krävs att bergets heterogena natur representeras i modellerna och att hänsyn tas till den skala i vilken man betraktar beräkningsproblemet. Olika typer av angreppssätt används och dessa representerar olika idealiseringar av hur grundvattnet strömmar. De idealiserade angreppssätten att beräkna grundvattenflöde kan indelas i diskreta modeller och kontinuum-modeller. I diskreta modeller strömmar vattnet genom nätverk uppbyggda av diskreta sprickplan /National Research Council, 1996; Dershowitz et al, 1995; Nordqvist, 1995; Long et al 1985; Cacas, 1990/. I kontinuum-modeller varierar bergets egenskaper kontinuerligt /Norman, 1992; National Research Council, 1996; Follin, 1992/. Vidare förekommer kanalnätverksmodeller /Gylling, 1997/ som dock ur grundvattenflödessynpunkt är att betrakta som en kontinuum-modell medan ansatserna för transport kan vara annorlunda jämfört med andra kontinuum-modeller, se avsnitt 5.8. Valet av modell beror på syftet med analysen ifråga, vilken geometrisk skala som ska studeras samt på tillgängliga data.

Oavsett valt modellkoncept måste modellerna inkludera de processer som enligt ovan påverkar grundvattenflödet på ett signifikant sätt. De hydrauliska drivkrafterna kommer bland annat in som randvillkor i modellerna, och dessa har ett stort inflytande på resultaten. Det rör sig framförallt om huruvida det dominerande bidraget till grundvattenrörelser på förvarsdjup kommer från regionala grundvattensystem eller från lokal topografi i kombination med brantstående strukturer /t ex Voss och Andersson, 1993/. Tar modelleringarna hänsyn till densitetsskillnader i grundvattnet orsakade av salthaltsvariationer och/eller temperaturskillnader måste även rand- och initialvillkor för temperatur och salthalt bestämmas /Follin, 1995/.

Ett stort antal experimentella studier har bedrivits under de senaste 20 åren vid bland annat Stripa gruva /Fairhurst et al, 1993; Gnirk, 1993; Gray, 1993; Olsson, 1992/, Äspölaboratoriet /Wikberg et al, 1991; Rhén et al, 1992; Emsley et al, 1997; Rhén et al, 1997/ samt i Finnsjön i Sverige /Ahlbom et al, 1991, 1992/. Även vid Grimsel i Schweiz och vid URL i Kanada har det utförts en rad betydelsefulla experimentella studier. Modelleringkoncept har testats och utvecklats inom SKB och en rad internationella projekt såsom Stripa, Decovalex /Stephansson et al, 1996/, Intraval /Larsson et al (eds), 1997/ och inom Task Force vid Äspölaboratoriet, exempelvis: /Gustafson och Ström, 1995; Svensson, 1997a, b/.

### **Tidsperspektiv**

Efter att djupförvaret förslutits kommer grundvattennivån ovan förvaret successivt att återställas till ursprungliga nivåer. Återställningen beror som tidigare nämnts på en rad faktorer. Lokala förhållanden är betydelsefulla. Troligen tar det tiotals år till kanske uppåt 100 år för grundvattnet att nå den ursprungliga, ostörda nivån. Tiden för att återställa grundvattennivån är emellertid kort jämfört med andra processer som kan påverka djupförvarets funktion. I kustnära områden kommer byggandet av slutförvaret att medföra att djupare liggande saltare vatten kommer att läcka in till tunnelsystemet. Hur lång tid det tar för att erhålla en saltvattensfördelning som liknar den ursprungliga är oklart.



Klimatförändringar och landhöjning är processer som ständigt pågår. Landhöjningen innan nästa kalla period med växande glaciär förväntas pågå under flera tusen år. Kallt klimat med ändrade nederbördsförhållanden, permafrost och glaciärer kommer sannolikt att påverka förhållandena i stora delar av Sverige under ca 10 000-100 000 år framåt i tiden. Det leder till långsamma förändringar av grundvattenbildningens storlek och mönster.

Tidsperspektivet för transport av lösta ämnen diskuteras under transportprocesser, avsnitt 5.8.

### **Naturliga analogier**

Geokemiska, hydrokemiska, paleogeologiska och paleohydrologiska studier kan ge en inblick i långsiktiga och storskaliga flödesmönster /se t ex Wallin, 1995/. Genom att studera fördelningen och sammansättningen av sprickmineral och grundvattnets sammansättning kan vissa slutsatser eller bedömningar göras av flödesmönster och flödesförhållanden. Konsistensen mellan den kemiska informationen och den hydrogeologiska informationen kan analyseras, vilket förstärker tilltron till plats specifika beskrivningar av geosfären.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Prediktioner av geosfärens egenskaper innehåller flera osäkerheter. Det beror bland annat på att man alltid är hänvisad till begränsade platsundersökningar och att det inte är möjligt att på ett fullständigt sätt beskriva hela bergvolymen i detalj. Osäkerheter i vattenförande strukturers existens, riktning, storlek och egenskaper gör att många flödesvägar från förvaret till biosfären är tänkbara. Större vattenförande strukturers existens, riktning, storlek och egenskaper kan vara kända med stor säkerhet inom vissa, väl undersökta bergvolymen, medan osäkerheten för samma strukturer, och andra, kan vara stor i bergvolymen med liten undersökningsintensitet. Möjligheten att tolka fältdata påverkas också av geologins komplexitet. Den rumsliga variabiliteten kan förväntas vara stor inom såväl identifierade större sprickzoner som i bergmassan mellan dessa zoner. Variabiliteten kan i praktiken endast beskrivas statistiskt eftersom antalet mätpunkter kommer att vara begränsat. Antalet mätpunkter och mätmetoder måste väljas så att ett tillfredsställande statistiskt underlag erhålls för beskrivningen av geosfären.

En betydande osäkerhet ligger i bestämningen av det sammanbundna nätverket av vattenförande strukturer. Sambandet geologiskt tolkade strukturer – hydrauliska strukturer är inte entydigt och i regel krävs mellanhålstester för att med säkerhet fastställa konnektivitet i en större skala och ett stort antal enhålstester för att erhålla statistiska mått på bergets flödesegenskaper. De utvärderade vattenledande egenskaperna från fältmätningar uppvisar också ett skalberoende som man måste ta hänsyn till när man ansätter egenskaper i en grundvattenflödesmodell. Det finns flera förslag på hur man kan göra skaltransformationer men det finns fortfarande osäkerheter kring hur det bör göras på ett korrekt eller acceptabelt sätt. Osäkerheter i modellerna kan emellertid minskas med hjälp av mätningar i fält. Genom att mäta tryck och flöde i bergmassan under olika förhållanden erhålls data som kan nyttjas för att testa och kalibrera modeller mot dessa data.

Genom studier av existerande glaciärer och struktur av den existerande kvartärgeologin har under de senaste tio åren stora framsteg gjorts kring förståelsen av vad som händer under en glaciär och nära dess front. Det kvarstår dock fortfarande stora osäkerheter om randvillkoren vid markytan under och nära en glaciär under en glaciationsperiod. Det är också stora osäkerheter relaterat till hur nästa glaciation ser ut i kvantitativa mått såsom isens framryckningshastighet, mäktighet etc.

## **Hantering i säkerhetsanalysen**

Vid modellering av grundvattenrörelser i säkerhetsanalysen är det av stor betydelse att belysa vad olika osäkerheter betyder för bergbarriärens tänkta funktion. Bedömningar av osäkerhetsintervall inom ramen för en platsbeskrivning gör det möjligt att definiera olika variationsfall i säkerhetsanalysen, som kan användas för att studera osäkerheternas konsekvenser. På liknande sätt kan olika tidsmässiga förändringar, som t ex klimatförändringar, landhöjning etc belysas med variationsanalyser.

**Basscenario:** I basscenariot är det av intresse att studera flöden på förvarnsnivå samt intransport till förvaret av mängd lösta ämnen i grundvattnet. Dessa faktorer kan påverka förvarets kemiska miljö och utveckling. Grundvattenflödesmodeller kan ingå som en viktig del i dessa analyser, alternativt kan överslagsmässiga massbalansberäkningar göras för att bestämma mängd av ämnen som kan transporteras till förvaret. Detta senare alternativ utnyttjas i SR 97.

Grundvattenflödesmodeller används även för att beskriva hur förvaret innan förslutning kan dra på sig saltvatten på grund av pumpning av tunnlarna (s k upconing) samt hur återmättnadsförloppet av tunnlar sker när väl pumpningen upphör. För denna typ av beräkningar krävs transienta simuleringar. Ett salt vatten vid förvaret kan påverka bentonitens funktion negativt. En långsam återmättnad innebär att etablerandet av reducerande förhållanden vid förvaret fördröjs. Dessa två processer bedöms dock enbart ha marginella effekter på den totala säkerheten och hanteras överslagsmässigt i SR 97.

**Kapseldefektscenario:** Detta är huvudscenariot inom SR 97 vad beträffar analys av radionuklidtransport i grundvatten. Utsläpp från defekta kapslar resulterar i grundvattentransport av radionuklider genom geosfären till utsläppspunkter i biosfären. Eftersom kapseldefektscenariot baseras på dagens förhållanden används icke-transient simulering, dvs geosfärens eventuella förändringar i tiden försummas.

Den primära storheten att beräkna är flöde av radionuklider till recipient (biosfär) givet ett visst flöde av nuklider från buffert/återfyllning. För att utföra dessa beräkningar utnyttjas inom SR 97 flödesmodeller på regional och lokal skala. De regionala modellerna ger en övergripande förståelse av storskaliga grundvattenströmningsmönster samt direkta randvillkor till de lokala modellerna. I de regionala modellerna inkorporeras densitetsdriven strömning vid behov, dvs grundvattnets sammansättning påverkar strömningen.

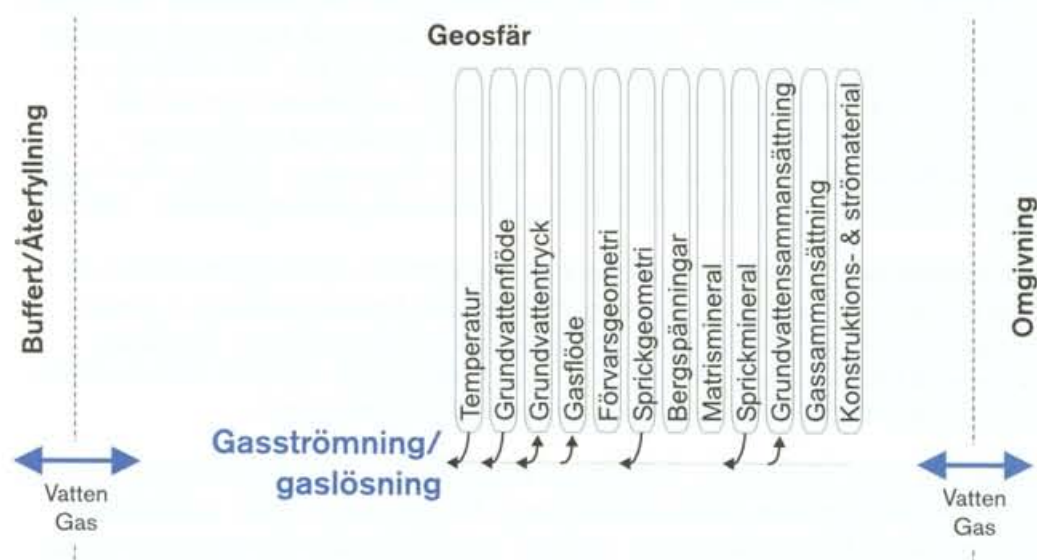
De lokala modellerna ger magnitud av strömning på förvarnsnivå samt flödesvägar genom geosfär till recipient. I de lokala modellerna i SR 97 inkorporeras inte densitetsdriven strömning. Resultaten från de lokala modellerna används för vidare beräkning av radionuklidtransport. Koden HYDRASTAR /Norman, 1992/ används för modellering av lokal grundvattenströmning i SR 97. Givet geosfärens naturliga variabilitet och vår begränsade tillgång till data tillämpas ett stokastiskt angreppssätt. Detta innebär att multipla realiseringar – alla lika sannolika – genereras i flödesmodellerna så att fördelningar snarare än enskilda värden av de relevanta parametrarna erhålls. Fördelningarna återspeglar en osäkerhet orsakad av den rumsliga variabiliteten.

Ingående värden på parametrar som definierar flödesmodellerna, t ex underliggande statistisk modell för hydraulisk konduktivitet, existens av väldefinierade vattenförande strukturer (sprickzoner) eller randvillkor, kan vara behäftade med osäkerheter. Denna parametriska osäkerhet analyseras ofta via variationsfall i säkerhetsanalysen. Variationsfallen kan ses som känslighetsanalyser där geosfärmodellernas respons för ändringar i ingående parametervärden systematiskt studeras.

**Klimatförändringar:** Klimatförändringar kan ha viktiga konsekvenser för geosfärens barriärfunktion. Klimatförändringarna kan innebära förändringar i både konduktivitetsfördelning och randvillkor samt förändrade kemiska förhållanden. I SR 97 tillämpas både transient simulering samt överslagsmässiga beräkningar för att belysa dessa effekter.

**Jordskalv:** Jordskalv kan innebära en mer eller mindre momentan förändring av sprickstruktur och resulterande konduktivitetsfördelning. I SR 97 hanteras dock inte denna aspekt av jordskalv, utan istället görs kvantitativa analyser av vilken magnitud av jordskalv som skulle krävas för att orsaka skada på förvarets kapslar. De mekaniska effekterna på förvaret bedöms således vara viktigare än mekaniska eller hydrauliska/hydrologiska effekter på geosfären.

### 5.5.2 Gasströmning/gaslösning



Figur 5-6. Gasströmning/gaslösning.

#### Överblick

Gas från förvaret kan transporteras genom berggrundens spricksystem upp till biosfären. Flöden av vatten och gas påverkar varandra i spricksystemet. Gas kan dessutom lösas i grundvattnet och därigenom transporteras som andra lösta ämnen med vattnet.

Gastransport kan vara betydelsefull dels eftersom den påverkar grundvattenströmningen, dels eftersom vissa radionuklider kan transporteras i gasfas.

#### Allmän beskrivning

Gas som genereras i avfallet kan innebära ökad belastning och eventuell sprickbildning i barriärerna i närområdet, samt påverka vattenströmningen. Gas som läcker ut genom närområdesbarriären kommer att passera genom tunnelområdet och den störda zon som omger tunneln. Det är möjligt att den störda zonen har en högre permeabilitet än det omgivande berget, och att den därmed utgör en preferentiell transportväg för gasen, se avsnitt 5.5.1. Så småningom transporteras gasen vidare ut i berget i fjärrzonen.

Gas kan även tillföras förvaret genom lufttillförsel vid byggandet av förvaret, som sedan finns kvar efter återfyllning. Återfyllningsmaterialet kan även innehålla avsevärda mängder luft. När förvaret stängs och vattentrycket ökar kan detta innebära att gasen löses i vattnet /Olsson, 1994/.

Gas löst i vatten följer grundvattenflödet. Strömningen av separata gas- och vattenfaser i berget kan allmänt beskrivas som ett tvåfasflöde. De krafter som påverkar strömningen av gas respektive vatten utgörs främst av gravitationen och trycket för respektive fas. Eftersom gas i regel är lättare än vatten ger gravitationen i regel en uppåtriktad kraft för gasströmningen. Tryckfördelningen i respektive fas (gas eller vatten) beror i hög grad på hur kapillärt bundet respektive fas är till det fasta mediet och beror därför på hur stor andel gas respektive vatten som finns i porutrymmena. I regel är den kapillära bindningskrafterna för vatten mycket starkare än de för gas varför vattnet får en tendens att sitta fast i berget. Detta innebär att den drivande kraften för vattentransporten tenderar att riktas från "våta" till mer "torra" områden. Förhållandet mellan mättnadsgrad och tryck för gas respektive vatten beror starkt på bergets sprick- och porgeometri. I allmänhet blir de kapillära krafterna starkare ju mindre porer och sprickor berget består av. För beräkningar krävs experimentella data. Bergsprickornas tvådimensionella natur kan innebära en större kanalisering av vattenflödet jämfört med två-fasförhållanden i tredimensionella media /Jarsjö, 1998; National Research Council, 1996/.

Storleken på gas- respektive vattenströmningen beror också på ledningsförmågan för respektive fas. Även ledningsförmågan beror starkt av mättnadsgraden för respektive fas. Detta gäller speciellt för vattnet där ledningsförmågan snabbt sjunker även vid ett måttligt inslag av gas i systemet. Detta beror på att de större sprickorna och porerna, som representerar den största ledningsförmågan, snabbt töms eftersom vattnet inte är så kapillärt bundet där. Gasen, å andra sidan, intar snabbt de stora porerna varför gasens ledningsförmåga snabbt stiger även vid en måttlig mättnadsgrad. Ledningsförmågans beroende av mättnadsgraden för respektive fas behöver bestämmas experimentellt om kvantitativa beräkningar ska göras.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Experiment har gjorts både i laboratoriemiljö och i fält. Fältundersökningar har t ex utförts vid Äspölaboratoriet /Jarsjö, 1998/ vid Stripa /Olsson (ed), 1992/ och Grimsel /Finsterle och Pruess, 1995/. I Jarsjö /1998/ redovisas genomförda laboratorieundersökningar.

Beräkningar som gjorts /Wikramaratna et al, 1993/ visar att det är möjligt att geosfären har stor kapacitet att transportera gas från förvaret upp till ytan. Det naturliga spricksystemet kan således utgöra en snabb transportväg för gasen.

### **Tidsperspektiv**

Tidsskalan för gastransport från förvaret till atmosfären är betydligt kortare än tidsskalan för vattentransport.

### **Naturliga analogier**

Inte relevant.

## **Sammanfattning osäkerheter**

En realistisk beskrivning av gasströmning i geosfären skulle vara behäftad med stora osäkerheter. I säkerhetsanalysen kan osäkerheterna hanteras genom att behandla processen pessimistiskt, se nedan.

## **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Där gas förekommer i spricksystemet leder detta till en minskad grundvattenströmning. Det är därför ur säkerhetsanalysens perspektiv pessimistiskt att försumma gastransport då grundvattenströmning modelleras.

**Kapseldefektscenario:** I den mån radionuklider kan förekomma i gasfas är det pessimistiskt att betrakta geosfären som kortsluten för gasen, dvs gasen når omedelbart biosfären vid utsläpp från bufferten. Detta behandlas i detalj i avsnitt 5.8.

## **5.6 Mekaniska processer**

### **5.6.1 Inledning**

#### **Allmänt**

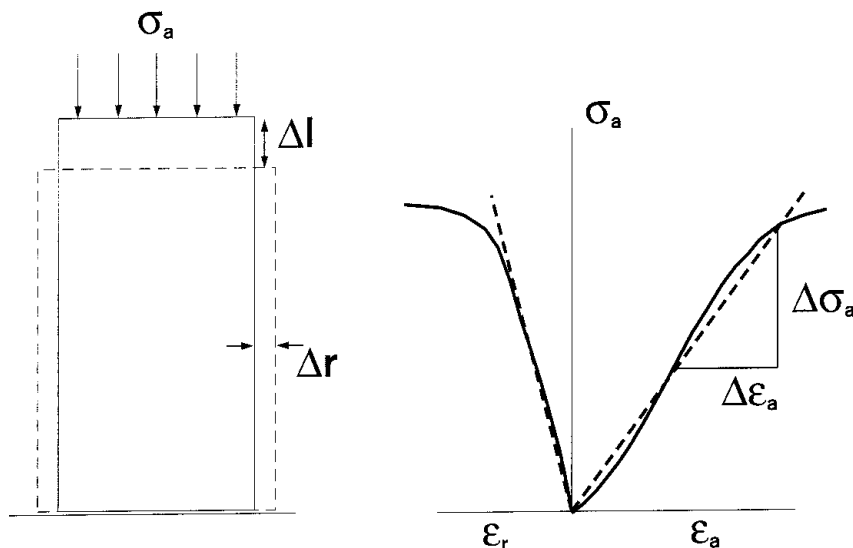
En av berggrundens fundamentala säkerhetsfunktioner är att på kort och lång sikt ge förvarets ingenjörbarriärer en mekaniskt stabil omgivning. Det innebär att buffertens och kapselns funktioner inte får förändras signifikant av deformationer hos berget. En annan säkerhetsfunktion hos berggrunden är att fördröja transport av radionuklider till biosfären, vilket från mekanisk synpunkt innebär att bergets retentionsegenskaper inte får allvarligt försämrats genom omfattande rörelser längs sprickor och sprickzoner eller genom omfattande nybildning av sprickor.

Generellt erbjuder det svenska urberget en omgivning som kan skydda och säkerställa förvarsfunktionerna. Sveriges urberg utgör en del av den Baltiska skölden, som sträcker sig från Kolahalvön och Karelen över Finland och Sverige till sydnorge. De bergarter som förekommer i olika provinser av den Baltiska skölden är cirka 900 till 2500 miljoner år gamla.

#### **Bergmassans deformations- och hållfasthetsegenskaper**

I mekanisk mening byggs bergmassan upp av intakt berg (bergblock) och av diskontinuiteter (främst sprickor och sprickzoner). När bergmassan belastas deformeras den dels genom att det intakta berget deformeras (eventuellt så att nya sprickor bildas), dels genom förskjutning, kompression eller vidgning av diskontinuiteterna. Bergmassans deformationsegenskaper beror alltså förutom av de ingående bergarternas hållfasthets- och deformationsegenskaper också av diskontinuiteternas frekvens, orientering och mekaniska egenskaper. Bergmassans deformations- och hållfasthetsegenskaper är skalberoende: stora bergvolymen genomskärs med större sannolikhet av stora sprickzoner.

De enskilda diskontinuiteternas och det intakta bergets deformations- och hållfasthetsegenskaper kan hyggligt beskrivas med hjälp av idealiserade spännings-deformations-samband och brottkriterier. Förutsatt att den betraktade bergvolymen är tillräckligt stor för att rymma en representativ uppsättning sprickor från typiskt fyra eller flera spricksystem kan detta sägas gälla också det sammansatta systemet, dvs bergmassan. För små bergvolymen med ett litet antal sprickor finns inga generella och enkla samband.



**Figur 5-7.** Bestämning av Young's modul och Poisson's tal genom enaxlig belastning av bergprov, där den axiella töjningen  $\epsilon_a$  och den radiella töjningen  $\epsilon_r$  bestäms för olika axiella laster  $\sigma_a$ . Vid små deformationer är spännings-töjningssambanden approximativt lineära, och Young's modul ( $E$ -modulen) erhålls enligt  $E = \Delta\sigma_a / \Delta\epsilon_a$ . Poisson's tal  $n$  är förhållandet mellan radiell och axiell töjning vid enaxlig kompression:  $n = \epsilon_r / \epsilon_a$ .

**Deformationsegenskaper:** De spänningar som genereras vid givna typer av deformationsförlopp som kompression, skjuvning och dragtöjning kan uppskattas med hjälp av spännings-töjningssamband.

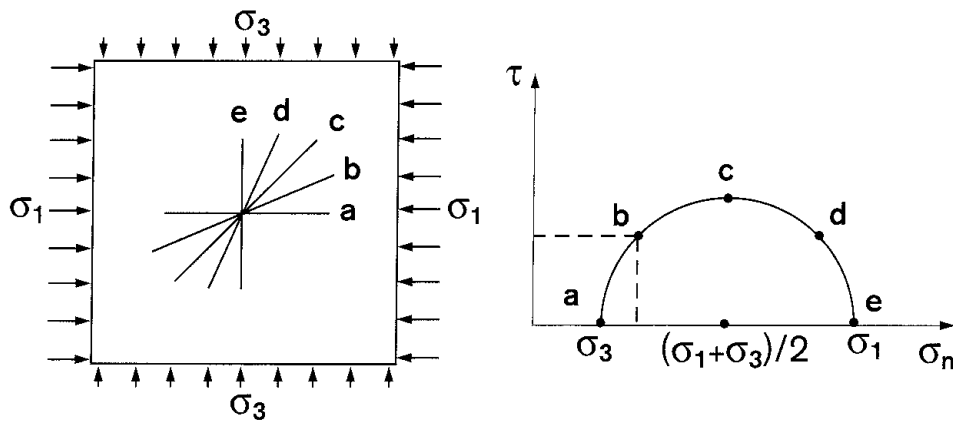
Vid små deformationer är förloppet i huvudsak reversibelt och kan karakteriseras med hjälp av elastiska parametrar: Young's modul, Poisson's tal (intakt berg) och skjuvstyvhets, normalstyvhets (diskontinuiteter). Figur 5-7 visar schematiskt innebörden av Young's modul och Poisson's tal.

Young's modul har dimensionen spänning, medan Poisson's tal är dimensionslöst.

För små deformationer av sprickor ger normalstyvhets  $K_n = \Delta\sigma_n / \Delta u_n$  och skjuvstyvhets  $K_s = \Delta\sigma_s / \Delta u_s$  på liknande sätt förhållandet mellan spänning och förskjutning i normal- respektive skjuvriktning.  $K_n$  och  $K_s$  har båda dimensionen spänning/längd.

För det sammansatta systemet, dvs för bergmassan, finns olika metoder att uppskatta elastiska parametrar som motsvarar de som används för intakt berg. Flera uttryck för  $E$ -modulen har t ex föreslagits där bergkvalitetsindexet RMR (Rock Mass Rating) vägs in /Brady och Brown, 1993/.

Vid långt drivna deformationer av intakt berg, sprickor och bergmassor ingår ett icke-reversibelt, eller plastiskt, bidrag. Så småningom uppstår i allmänhet brott, dvs en största spänning uppnås, som under de givna förutsättningarna utgör systemets hållfasthet (t ex ett bergprovs enaxliga tryckhållfasthet eller en sprickas skjuvhållfasthet vid given normalkompression).



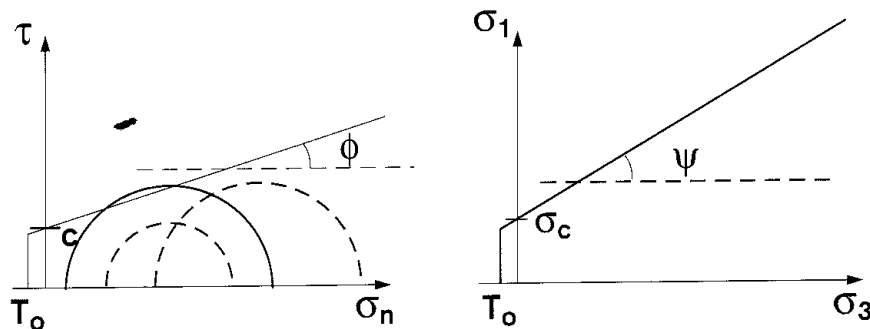
**Figur 5-8.** Spänningstillstånd illustrerat med Mohr's cirkel. Om man bortser från skjuvspänningarnas tecken är problemet symmetrisk och halva cirkeln räcker. De streckade linjernas skärning med koordinataxlarna anger normalspänningen och skjuvspänningen i plan orienterade som planet *b*.

**Spänningstillstånd:** Bergspänningstillståndet är variabel för alla mekaniska processer. Spänningstillstånd är tensorer, och karakteriseras av tre sinsemellan vinkelräta huvudriktningar som var och en svarar mot en huvudspänning. Om alla tre huvudspänningarna,  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  och  $\sigma_3$  är lika stora är spänningstillståndet isotropt och huvudriktningarna obestämda. Om huvudspänningarna är olika stora är spänningstillståndet anisotropt eller deviatoriskt. Förenklat bortser man ofta från den mellersta huvudspänningen  $\sigma_2$ . Spänningstillståndet kan då illustreras med Mohr's cirkel så som visas schematiskt i figur 5-8. Alla punkter på cirkeln svarar mot plan, eller orienteringar av plan, i ett medium med största och minsta huvudspänningarna  $\sigma_1$  och  $\sigma_3$ . Den horisontella koordinaten ger den normalspänning  $\sigma_n$  som verkar i planet, den vertikala koordinaten ger skjuvspänningen  $\tau$ . Om  $\sigma_1$  och  $\sigma_3$  är lika stora existerar inga skjuvspänningar och halvcirkeln urartar till en punkt. Den maximala skjuvspänningen  $(\sigma_1 - \sigma_3)/2$  verkar på planet *c* i figuren ( $45^\circ$  mot huvudspänningsriktningarna). Normalspänningen i planet *c* är lika med medeltrycksspänningen  $(\sigma_1 + \sigma_3)/2$ . I planen *a* och *e*, som är huvudspänningsplan, verkar inga skjuvspänningar.

De spänningar som verkar i berggrunden innan någon påverkan genom berguttag eller uppvärmning har skett, kallas de primära eller de naturliga bergspänningarna. För den svenska berggrunden brukar man kunna anta att en av de primära huvudspänningarna (vanligen den minsta) är approximativt vertikal och motsvarar tyngden av det överliggande berget, vilket innebär cirka 13,5 MPa på 500 m djup. De största och mellersta huvudspänningarna är då båda approximativt horisontella. Både allmänna och plats-specifika regressions samband mellan primära horisontalspänningar och djup finns, men variationerna är stora, både mellan olika platser och lokalt inom mindre områden. För Beberg och Ceberg ger sambanden en största horisontalspänning på 500 m djup av 23 MPa respektive 20 MPa /Ljunggren et al, 1998/. I Aberg har horisontalspänningar i storleksordningen 35–40 MPa och betydande anisotropier i horisontalplanet mätts upp /Leijon, 1995/.

**Hållfasthetsegenskaper:** Hållfastheten hos bergmekaniska system beror av lastförhållandena. Idealiserade samband, brottkriterier, ger beroendet som relationer mellan huvudspänningarna  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  och  $\sigma_3$ , eller mellan den skjuvspänning  $\tau$  och den normalspänning  $\sigma_n$  som verkar på något speciellt plan. För de kriterier som vanligen tillämpas på berg, dvs Coulombs kriterium och Hoek-Browns kriterium, antar man att man kan bortse från inflytandet av den mellersta huvudspänningen  $\sigma_2$ .

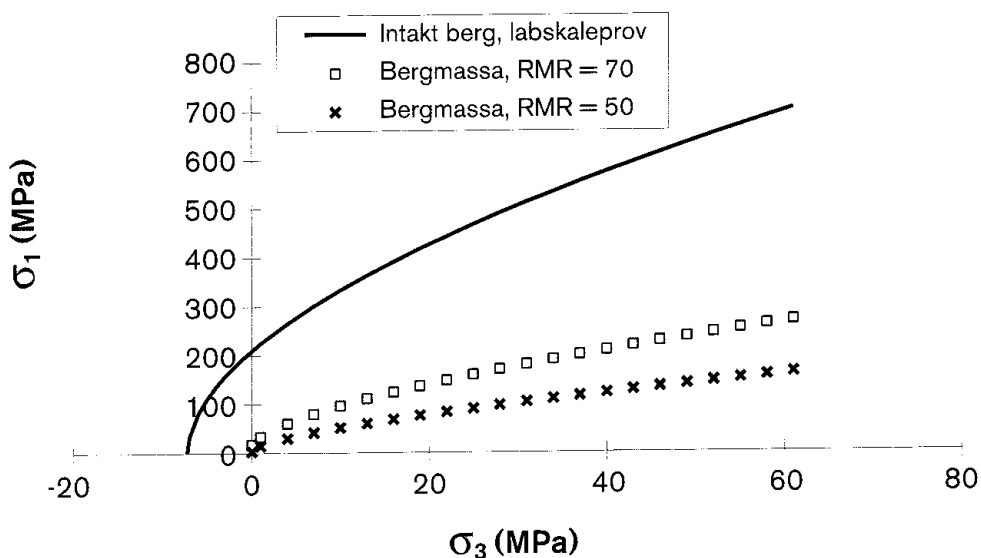




**Figur 5-9.** Brottenuvelop enligt Coulomb i termer av a) skjuv- och normalspänningar och b) huvudspänningar.  $c$  = kohesion,  $\phi$  = friktionsvinkel,  $\sigma_c$  = enaxlig tryckhållfasthet,  $T_o$  = enaxlig draghållfasthet. Envelopens lutning i huvudspänningsrepresentationen ges av  $\tan\psi = (1 + \tan\phi) / (1 - \tan\phi)$ . Den heldragna Mohr-cirkeln representerar, i motsats till de båda streckade, ett spänningstillstånd för vilket hållfastheten överskrids.

Figur 5-9 visar enveloper, eller brottgränskurvor, baserade på Coulomb's kriterium. Kriteriet ger en god representation av enskilda diskontinuiteters skjuvhållfasthet, men tillämpas ofta på grund av sin enkelhet också på intakt berg och på bergmassor trots att det då bygger på antaganden som sällan är helt uppfyllda. En enkel hållfasthetsanalys vid givet spänningstillstånd kan då göras genom att jämföra envelopen med Mohr's cirkel. Två oberoende parametrar ingår: kohesion och friktionsvinkel.

Coulombs kriterium är tillämpligt i första hand på enskilda sprickor. För intakt berg och för bergmassor med minst 4 godtyckligt orienterade sprickgrupper ger Hoek-Browns brottkriterium en bättre hållfasthetsuppskattning. Figur 5-10 visar brottenuvelop enligt Hoek-Brown, dels med parametervärden som är typiska för intakt granit, dels med parametervärden som justerats för att gälla bergmassor med olika RMR index /Brady och Brown, 1993/.



**Figur 5-10.** Brottenuveloper enligt Hoek-Brown.

Även om resultatet av tillämpning på bergmassan måste tolkas med försiktighet, visar figur 5-10 på ett principiellt viktigt förhållande: sprickornas avgörande betydelse för bergmassans hållfasthet.

**Stabilitet:** Berget, eller bergmassan, är ett mekaniskt system som normalt befinner sig i statisk jämvikt under de rådande lasterna, dvs inga obalanserade krafter förekommer. Jämvikten kan dock vara mer eller mindre stabil. Om små störningar av jämvikten leder till plötslig minskning av systemets potentiella energi och stora förändringar i geometrin, är jämvikten inte stabil. Störningar av jämvikten kan bero på lastförändringar eller på att hållfasthetsegenskaperna förändras, t ex på grund av förändringar av grundvattentrycket eller på grund av hydrotermala förändringar av materialet i fyllda sprickor.

Instabilitet i förvarsberget förutsätter att bergmassan, lokalt eller globalt, befinner sig nära brotttillstånd, dvs att spänningstillståndet svarar mot en punkt nära brottenvelopen. Brotttillståndet som sådant behöver däremot inte innebära allvarlig instabilitet: små deformationer, utan konsekvenser för funktion och säkerhet, kan vara tillräckliga för att systemet ska återvinna jämvikten om brott skulle uppstå.

### **Processer i säkerhetsanalysen**

Alla mekaniska processer i förvarsberget har att göra med deformationer och alla deformationer har att göra med laster och spänningar. Dessa grundläggande begrepp kopplar ihop bergmassans komponenter, det intakta berget och diskontinuiteterna, med varandra på ett sätt som gör att det inte finns någon riktigt logisk och samtidigt ändamålsenlig uppdelning av geosfärens mekanik i enskilda processer. Sprickpropagering t ex innebär ju samtidigt pågående plastisk deformation av intakt berg och rörelse i befintlig spricka. Nedanstående uppdelning i processer har ändå bedömts som ändamålsenlig:

1. Rörelse hos intakt berg.
2. Termisk rörelse.
3. Rörelser längs befintliga diskontinuiteter
4. Sprickbildning (nybildning och propagering).
5. Tidsberoende deformationer.

Med 'rörelse hos intakt berg' avses de i huvudsak elastiska rörelser som uppträder i berg utan synliga sprickor vid måttliga belastningar, dvs vid belastningar som inte ger brott.

Med 'termisk rörelse' avses en grundläggande termomekanisk process i intakt berg: volymexpansion orsakad av ökade värmerörelser i kristallmatrisen vid temperaturförhöjning. Volymexpansionens effekter i form av rörelser längs sprickor eller brott och uppsprickning i inspänt, uppvärmt berg sorterar under processerna 'rörelser längs befintliga diskontinuiteter' och 'sprickbildning'.

Med 'reaktivering – rörelser längs befintliga diskontinuiteter' avses alla typer av rörelser, elastiska och inelastiska, som sker längs diskontinuiteter av olika slag.

Med 'sprickbildning' avses brott i intakt berg, både genom nybildning av sprickor och genom tillväxt av befintliga sprickor.

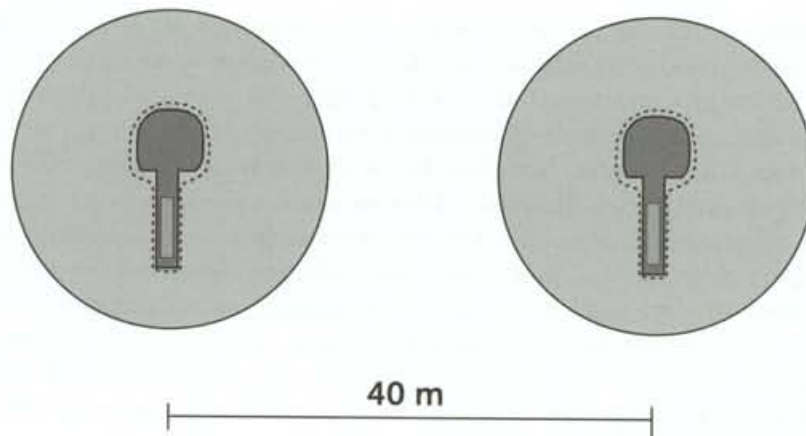
Alla deformationer i förvaret är tidsberoende i den meningen att alla lastförändringar, momentana (tidsdiskreta) som tidskontinuerliga, är fördelade över tiden. De tidskontinuerliga mekaniska processer som i princip äger rum i samma takt som lastförändringarna sker, och enligt de spännings-deformationssamband som antas gälla för bergmassans olika komponenter, betraktas här som icke tidsberoende. Med 'tidsberoende deformationer' avses fördröjda deformationer som uppstår på grund av att berget i långa tidsperspektiv har, eller kan ha, tidsberoende materialegenskaper. Gränsdragningsproblem finns: I processen 'sprickbildning' finns t ex ett inbyggt tidsberoende som har att göra med initiering och utveckling av mikrosprickor vid laster som är lägre än den laboratoriebestämda hållfastheten, och som efter någon tid kan leda till brott, t ex smällberg intill hålrumsväggar. Samma typ av fenomen kan tänkas äga rum i långsam takt på många ställen och på olika avstånd från förvarets hålrum, t ex i små områden kring ansträngda sprickklackar, och bidrar då till att bergmassan uppvisar tidsberoende deformationsegenskaper.

Bergmassan byggs upp av intakt berg och av diskontinuiteter. Därför är 'rörelse hos intakt berg', 'reaktivering' och 'sprickbildning' grundläggande och allmänna processer. Rörelse hos intakt berg sker vid alla belastningsförändringar. Finns lämpligt orienterade sprickor sker rörelserna dessutom, och i första hand, längs dessa. Vid stora belastningar tillkommer ibland sprickbildning, framförallt om det inte finns lämpligt orienterade sprickor utefter vilka rörelserna kan ske. 'Termisk rörelse' är också en fundamental process, men till skillnad från de andra tre orsakas den inte av belastningsförändringar. Tvärtom orsakar processen belastningsförändringar och driver därför de övriga tre processerna. 'Tidsberoende deformationer' slutligen, utgörs av tidsfördröjda rörelser i intakt berg och tidsfördröjd reaktivering och sprickbildning, och är därför strängt taget inte en egen process. Kunskapen om tidsfördröjda deformationer är dålig och det är därför ändå ändamålsenligt att betrakta den sammantagna effekten av alla sådana deformationer och samtidigt pågående förändringar av bergmassans materialegenskaper som en särskild process.

### **Initialtillståndet**

Efter deponering och förslutning befinner sig förvarsberget i vad som i säkerhetsanalysen benämns initialtillståndet. Mekaniskt karakteriseras initialtillståndet av att berget kring tunnlar och deponeringshål påverkats av den jämviktsrubbnings, med följande deformationer och omfördelning av spänningar, som uppstått vid uttag av de olika hålrummen. Processerna rörelse hos intakt berg och rörelse längs befintliga diskontinuiteter har alltså redan ägt rum, möjligen också sprickbildning. När det gäller spänningsomfördelningen är räckvidden av påverkan några tunneldiametrar, räknat från tunnelväggen (figur 5-11). Dessutom har berget allra närmast hålrummens väggar direkt påverkats, eller skadats, av sprängningen eller borrningen. Den skadade zonen (EDZ) har ett djup av någon cm upp till en halvmeter, beroende på den använda drivningsmetoden /Olsson et al, 1996; Autio, 1997/.

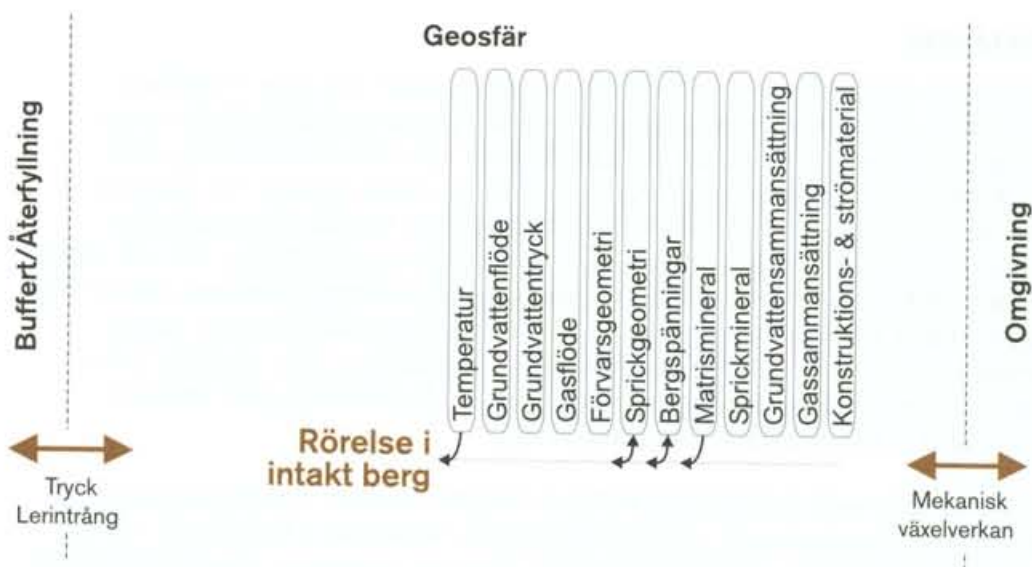
Under konstruktions- och deponeringskedet är berget dränerat. I initialtillståndet är därför sprickornas porvattentryck närmast hålrummen reducerat i förhållande till det naturliga grundvattentrycket. Mekaniskt innebär detta att sprickorna skjuvhållfasthet är högre än vad den kommer att vara när grundvattentrycket senare återställs.



Figur 5-11. Schematisk bild av skadezon, EDZ, (innanför prickade kurvan) och spänningspåverkad zon.

Utanför den spänningspåverkade zonen verkar fortfarande de primära bergspänningarna. Inom zonen råder sekundärspänningar som karakteriseras av stora tangentialspänningar och små radialsänningar, dvs stora spänningsanisotropier och därför stora skjuvspänningar. Sekundärspänningarnas storlek och anisotropi beror starkt av primärspänningarna och av tunnelarnas riktning i förhållande till primärspänningarna. Om tunnelarna är vinkelräta mot den största primära huvudspänningen kan man få så stora tagentiella tryckspänningar i ett litet område kring skärningen mellan tunnel och deponeringshål att berget där med stor sannolikhet befinner sig i brottillstånd /Hökmark, 1996/.

### 5.6.2 Rörelse i intakt berg



Figur 5-12. Rörelse i intakt berg.

### **Överblick, allmän beskrivning**

Inga mekaniska processer i geosfären kan äga rum utan att också rörelser i det intakta berget äger rum. Processen har däremot knappast någon egen direkt inverkan på säkerheten.

För intakt kristallint berg gäller med god noggrannhet lineärelastiska samband för homogena isotropa medier. Vid given belastning är rörelserna därför bestämda av två elastiska parametrar, t ex Young's modul och Poisson's tal.

**Påverkan av bergspänningar, påverkan på bergspänningar:** Kopplingen till bergspänningarna är given av lineärelastiska spännings-töjningssamband och av de elastiska parametrarna.

**Påverkan av sprickgeometri, påverkan på sprickgeometri:** Sprickorna och det intakta berget påverkar varandra via bergspänningarna.

**Påverkan av temperatur:** Inom temperaturområdet 0–150 °C är de elastiska parametrarnas temperaturberoende försumbart /Lau et al, 1991/. Temperaturförändringar är däremot avgörande för de termiska rörelserna i intakt berg.

**Påverkan av matrisegenskaper:** Mineralsammansättning och kornstorlek inverkar på de elastiska egenskaperna.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Inga konceptuella osäkerheter finns när det gäller beskrivning av rörelser hos intakt berg. En viss dataosäkerhet finns när det gäller Young's modul och Poisson's tal. Dels finns en statistisk variation hos laboratoriebestämda värden, dels en variation som beror på provningsteknik. Dessutom finns en variation mellan bergarter, dvs mellan berg av olika matrisammansättning. För de bergarter som förekommer i Äspö HRL gäller att Young's modul ligger mellan 60 och 80 GPa /Rummel, 1997; Stille och Olsson, 1996/. Poisson's tal ligger mellan 0,18 och 0,27.

### **Modellstudier/experimentella studier**

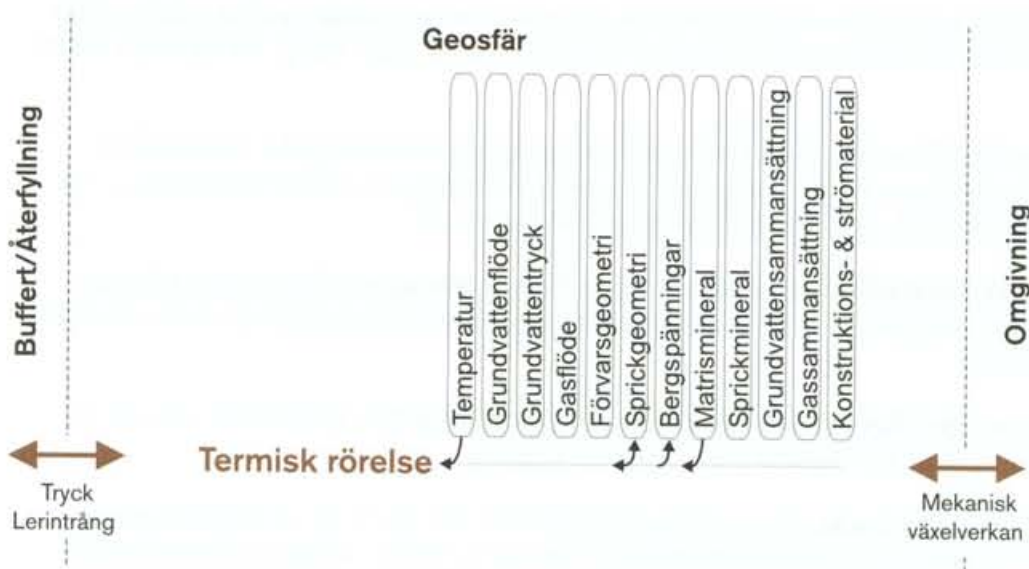
Det intakta berget ingår i alla numeriska studier av spänningar och deformationer i förvarsberget. Bergmassans mekaniska uppbyggnad är dock sådan att alla väsentliga förskjutningar lokaliseras till diskontinuiteter av olika slag.

Det intakta berget är approximativt lineärelastiskt, och man kan därför få en uppfattning om hur geometrin hos förvarets hålrum skulle påverkas vid lastförändringar om bergmassan i sin helhet vore uppbyggd av intakt berg genom att tillämpa analytiska uttryck, Kirsch ekvationer för spänningar och deformationer kring cirkulära hålrum, på hypotetiska lastfall. Alla rimliga lastfall ger då försumbara deformationer av deponeringshålsgeometrin.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

Det bidrag till förändring av geometrin hos deponeringshål som beror på rörelser hos intakt berg är utan betydelse för säkerhet och funktion.

### 5.6.3 Termisk rörelse



Figur 5-13. Termisk rörelse.

#### Överblick

Då kapslar med använt bränsle deponeras i berggrunden kommer bergets temperatur att öka på grund av bränslets resteffekt. För en fri volym av intakt berg skulle en uniform temperaturökning ge en volymexpansion som bara beror av bergartens lineära temperaturutvidgningskoefficient. Eftersom berget i förvaret är inspant undertrycks expansionen helt eller delvis och termospänningar genereras i kapselhålens och förvarets omgivning. Storleken av volymexpansionen och termospänningarna beror på temperaturutvidgningskoefficienten och bergets kompressionsegenskaper.

#### Allmän beskrivning

**Påverkan på bergspänningarna:** Det uppvärmda berget är inspant av det omgivande icke-uppvärmda berget, vilket gör att den termiska rörelsen blir liten, medan istället termospänningarna blir stora. Termospänningarna motsvarar den last som skulle behövas för att komprimera ett fritt expanderat bergelement till den volym elementet faktiskt upptar vid den givna temperaturen, och beror därför på bergets deformationssegenskaper.

**Inverkan av temperatur:** Temperaturförändringar är orsaken till att processen alls äger rum. Bergtemperaturen i olika punkter, både i närfältet och på stort avstånd från deponeringshålen kan beräknas analytiskt /Claesson och Probert, 1996/. Om man antar att initialtemperaturen är 15 °C blir den maximala temperaturen vid deponeringshålens rand cirka 70 °C. Inom detta temperaturintervall är temperaturutvidgningskoefficienten för granit i det närmaste oberoende av temperaturen /Swan, 1978/.

**Inverkan av sprickgeometri, påverkan på sprickgeometri:** Allmänt gäller, som för rörelse i intakt berg, att sprickor påverkas via spänningarna. Förekomst av sprickzoner med liten normalstyvhet i förvarsberget innebär att den ekvivalenta E-modulen blir liten vilket innebär att termospänningarna begränsas. Förekomst av kompressibla sprickzoner utanför förvarsberget gör att en större volymexpansion medges, vilket också innebär att termospänningarna blir mindre.

**Påverkan av matrissammansättning:** Temperaturutvidgningskoefficienten är i princip beroende på bergarten, men variationerna är inte stora och de värden som allmänt används är rimliga medelvärden.

### ***Tidsperspektiv***

Den maximala temperaturen uppnås cirka 50 år efter deponering. Efter cirka 5000 år är temperaturen i förvarsberget cirka 15 °C över den ursprungliga. De största termospänningarna erhålls kring deponeringshål från 50 år till cirka 200 år efter deponering /Hökmark, 1996/.

### ***Modellstudier/experimentella studier***

Probert och Claesson /1997/ gjorde analytiska termomekaniska beräkningar där berggrunden antogs vara ett halvoändligt elastiskt kontinuum med elastiska parametrar ungefär som för intakt berg. Den maximala globala termospänningen blev cirka 17 MPa. Hakami et al /1998/ gjorde numeriska beräkningar som visade att de maximala globala termospänningarna halverades om man antog att förvarsberget genomskars av ett antal kompressibla sprickzoner. Hökmark /1996/ gjorde numeriska närfältsstudier med en elastisk modell som visade att termospänningarna i skärningen deponeringshål/tunnel är mellan 20 och 40 MPa, beroende på vilka inspänningsförhållande som antas.

### ***Sammanfattning av osäkerheter***

**Osäkerheter i förståelse:** Inga konceptuella osäkerheter finns för processen.

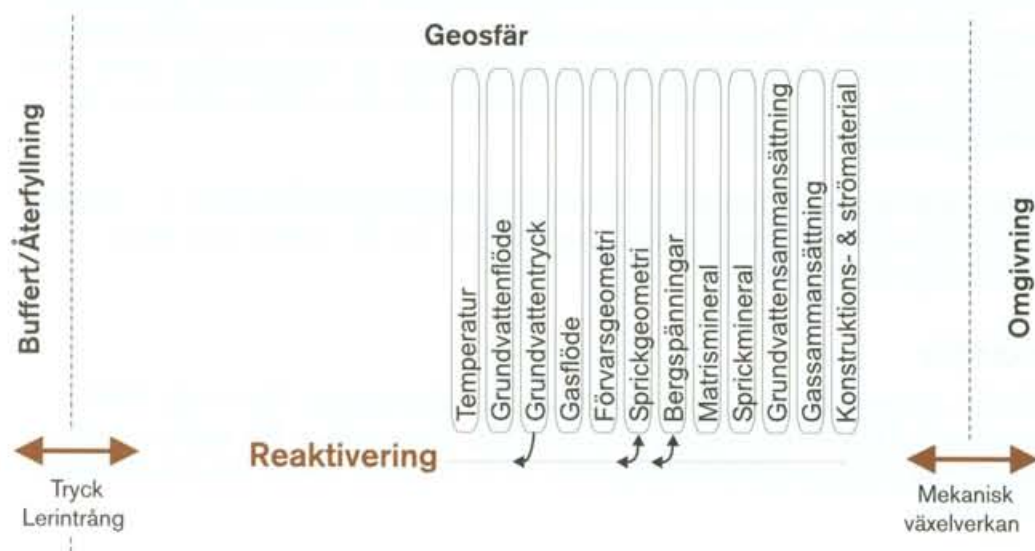
**Osäkerheter i data:** Också dataosäkerheten är liten. Mellan olika typer av granit varierar temperaturutvidgningskoefficienten mellan  $6,7 \cdot 10^{-6}$  och  $8,4 \cdot 10^{-6}$  per °C /Swan, 1978/. Den största osäkerheten gäller inspänningsgraden, dvs vilken volymexpansion av förvarsberget som verkligen kommer att medges, och vilka kompressionsegenskaper förvarsberget har.

### ***Hantering i säkerhetsanalysen***

De termiska rörelserna som sådana har inga direkta effekter på säkerheten. Det termiska lasttillskottet kan däremot tillsammans med de laster som verkar redan i initialtillståndet innebära att hållfastheten för intakt berg och för enskilda sprickor överskrids. I processerna "reakivering" och "sprickbidning" behandlas effekterna av det termiska lasttillskottet.



## 5.6.4 Reaktivering – rörelse längs befintliga sprickor



Figur 5-14. Reaktivering – rörelse längs befintliga sprickor.

### Överblick

Den mest grundläggande mekaniska processen hos geosfären från säkerhetssynpunkt är rörelser hos stora diskontinuiteter. Diskontinuiteter av alla typer, från millimeterstora sprickor till sammansatta sprickzoner med utbredning av flera kilometer, är mekaniska system vars uppträdande styrs av de belastningar de utsätts för, av det rådande grundvattentrycket och av sina egna inneboende mekaniska egenskaper. Två huvudtyper av deformationer finns: skjuvrörelser och normalrörelser. I verkligheten uppträder de två typerna av deformation parallellt.

### Allmän beskrivning

I närfältsskalan, möjligen också i tunnelskalan, framträder stora sprickzoner knappast som diskreta diskontinuiteter utan i form av ökad frekvens av enkla sprickor eller som områden med avvikande mekaniska egenskaper. I förvarsskalan är det däremot ändamålsenligt att betrakta stora sprickzoner som diskreta diskontinuiteter. Enkla sprickor i bergmassan utanför de stora sprickzonerna bidrar till bergmassans genomsnittsegenskaper, men framträder i förvarsskalan inte som individuella enheter. Kunskapsläget för deformations- och hållfasthetsegenskaperna är väsentligt olika för enkla sprickor och för stora sprickzoner.

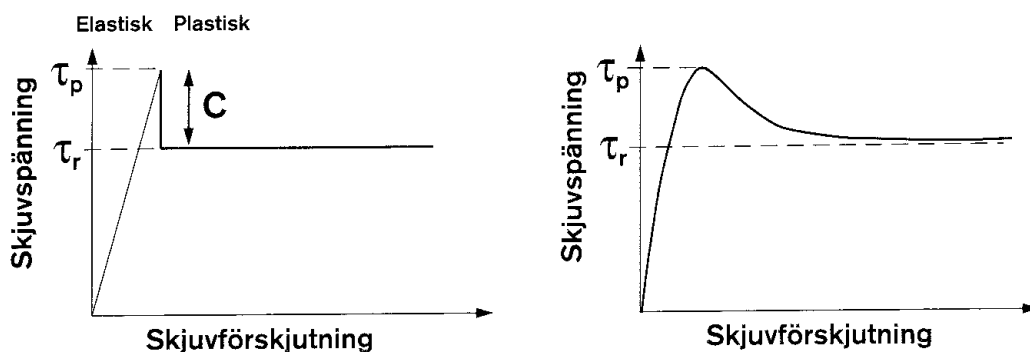
**Normalrörelser:** Rörelser i normalriktning kan ske dels på grund av förändringar av den effektiva normalspänningen (t ex ökad eller minskad kompression, ökat eller minskat vattentryck i sprickan), dels på grund av långt gångna skjuvdeformationer där ojämnheter tvingar sprickytorna att separera (dilatans).

För rena normalbelastningar gäller att ju större normalstyvheten hos diskontinuiteten är, desto mindre mekanisk betydelse har diskontinuiteten. Oändlig normalstyvhet är ekvivalent med att diskontinuiteten inte existerar. För enkla sprickor gäller att normalstyvheten är starkt normalspänningsberoende, vilket innebär att styvheten är stor för sprickor i hög kompression och mindre för sprickor i låg kompression /Hökmark, 1991; Barton et al, 1985/. För stora sprickzoner är normalspänningsberoendet däremot litet /Leijon, 1993/. För stora zoner kan man för normalspänningar av cirka 10 MPa anta att normalstyvheten är omkring två storleksordningar mindre än för enkla ofyllda sprickor.

För sprickor som inte ligger i sprickzoner är de inbördes sprickavstånden stora, vilket tillsammans med stor normalstyvhet och små mekaniska aperturer gör att rena normalrörelser hos enskilda enkla sprickor i allmänhet har liten betydelse för bergmassans mekaniska egenskaper. Sprickzoner med liten normalstyvhet däremot kan absorbera stora kompressioner och påverkar därmed bergmassans mekaniska egenskaper.

**Skjuvrörelser:** Deformations- och hållfasthetsegenskaperna hos enkla sprickor beror komplext av bland annat hållfastheten hos materialet i sprickyterna och sprickyternas topografi. Med Bartons system /Barton et al, 1985/ kan man ta fram empiriskt baserade spännings-deformations samband för både skjuvrörelser och normalrörelser. Systemet bygger på laboratoriebestämning av värden för ett litet antal fundamentala sprickparametrar enligt ett standardiserat förfarande. Dessa är sprickans residualfriktionsvinkel  $\phi_r$ , sprickans ytråhet JRC och sprickans ythållfasthet JCS.

För enkla sprickor finns således utvecklade materialmodeller som väl beskriver typ och storlek hos sprickrörelser vid givna belastningsförhållanden, förutsatt att de ansatta parametervärdena är representativa för sprickan i sin helhet. I praktiken, t ex vid numerisk simulering av bergmekaniska problem, känner man inte parametervärdena utan är hänvisad till uppskattningar, till exempel baserade på jämförelser med fall där man verkligen gjort systematiska laboratoriebestämningar. Vid analys av rörelser hos enskilda sprickor i en bergmassa är i själva verket inte det största problemet att man inte känner sprickans materialegenskaper med tillräcklig noggrannhet, utan att man måste göra antaganden om sprickans läge, orientering, utsträckning och samverkan med andra sprickor. Dessa geometriska förhållanden är oftast viktigare än detaljer i materialegenskaperna, varför man i praktiken använder sig av enklare och robustare materialmodeller som ändå återger grunddragen i mera utvecklade modeller. I figur 5-15 visas som exempel jämförelse mellan Bartons modell för skjuvrörelse och ideal elastoplastisk modell med brottkriterium enligt Coulomb.

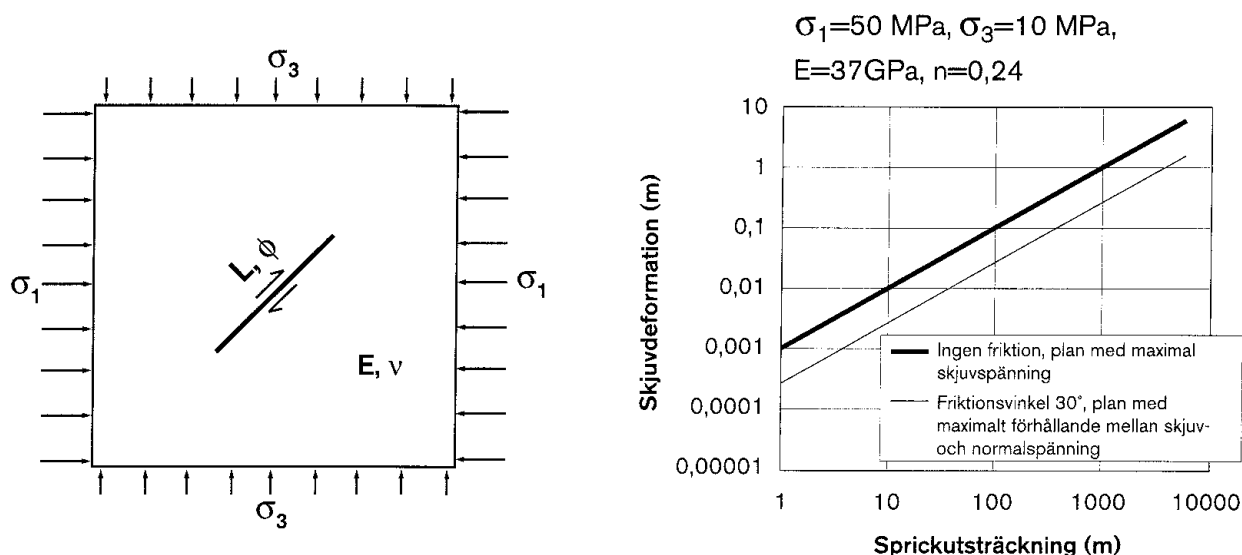


Figur 5-15. Spännings – deformations samband för enkel spricka.  $\tau_p$  = hållfasthet vid brott,  $\tau_r$  = residualhållfasthet,  $\phi$  = friktionsvinkel,  $\sigma_n$  = normalspänning,  $c$  = kohesion, JCS = Joint Compressive Strength, JRC = Joint Roughness Coefficient.

Den elastiska delen av deformationen kan uppgå till någon millimeter /Barton och Vik, 1988; Olsson, 1998/. Skjuvrörelser som är av sådan storlek att de har betydelse för säkerheten är därför huvudsakligen friktionskontrollerade.

För sprickzoner, d v s strukturer som är uppbyggda som system av enkla sprickor finns inga empiriskt baserade generella materialmodeller. Vidd och sprickfrekvens, samt graden och arten av samverkan mellan ingående sprickor kan variera inom vida gränser för en och samma sprickzon. Om man begreppsmässigt föreställer sig sprickzonen som en diskret diskontinuitet får man anta mekaniska egenskaper som representerar den sammantagna inverkan av de ingående sprickorna. Någon kunskap eller erfarenhet liknande den som finns för beskrivning av enkla sprickors mekaniska egenskaper finns inte, men i allmänhet antar man att rörelser i skjuvriktningen är kontrollerade av friktion.

**Påverkan av sprickgeometri:** Generellt inverkar spricksystemets geometri på den enskilda sprickans rörelser genom sin inverkan på bergmassans deformationsegenskaper. Speciellt har en sprickas eller sprickzons utsträckning i sitt eget plan en stor betydelse för vilken största skjuvdeformation som kan ske vid given belastning /Turcotte, 1992/. För en spricka i ett elastiskt medium kan den maximala deformationen bestämmas analytiskt /Pollard och Segall, 1987/ och beror på sprickans utsträckning och friktionsvinkel, och på bergets elastiska egenskaper. Om man pessimistiskt antar att sprickans friktionsvinkel är noll, kan man för olika belastningsfall gränssätta den största skjuvdeformation man kan få hos sprickor av olika utsträckning i förvarsberget. Figur 5-16 visar ett sådant analytiskt samband mellan sprickutsträckning och största möjliga skjuvrörelse. Sambandet är pessimistiskt och avser det teoretiska fallet att sprickan har oändlig utsträckning vinkelrätt figurens plan. För att få en 0,1 m förskjutning i denna tvådimensionella geometri och med maximala skjuvspänningen 20 MPa krävs en minst 100 m lång friktionsfri spricka. För en spricka med friktionsvinkel 30° fordras en cirka 400 m lång spricka. För verkliga sprickor, med ändlig utsträckning i alla riktningar, blir deformationerna mindre.



**Figur 5-16.** Spricka med utsträckning  $L$  och friktionsvinkel  $\phi$  i elastiskt medium med elasticitetsparametrarna  $E$  och  $\nu$ . Skjuvdeformationen är maximal vid sprickans centrum och noll vid sprickans kanter. Diagrammet visar relationen maxförskjutning – sprickutsträckning för ett pessimistiskt 2D-fall.

**Påverkan på sprickgeometri:** Normalrörelser påverkar enskilda sprickors apertur.

**Inverkan av bergspänningar:** Bergspänningarna har stor betydelse för processen. Om spänningstillståndet är starkt anisotropt, dvs om skillnaden mellan största och minsta huvudspänningen är stor, kommer det att finnas sprickplan med stora skjuvspänningar och små normalspänningar, vilket innebär större risker för skjuvbrott vid framtida förändringar av bergspänningarna. Stora primära huvudspänningsskillnader kan också ge förstärkt spänningsanisotropi runt tunnlar och deponeringshål, vilket innebär ökad omfattning av skjuvrörelser hos sprickor i närfältet.

**Påverkan på bergspänningar:** Tanken att spänningstillståndet i jordskorpan delvis är bestämt av friktionen i stora sprickzoner har förts fram av bland annat Jaimson och Cook /1978/. Innebörden är att förhållandet mellan skjuvspänning och medeltrycksspänning är uppåt begränsat, och att framtida lastförändringar som skulle innebära att gränsen överskrids ger upphov till friktionskontrollerade skjuvrörelser så att spänningsförhållandet återställs. Resonemanget, som innebär att berggrunden alltid befinner sig i instabilt tillstånd, kan bara tillämpas på den största skalan /Leijon, 1993/. I närfältet ger rörelser längs diskontinuiteter som är tangentiellt riktade i förhållande till hålrum förhöjda tangentialspänningar mellan hålrum och spricka. Rörelser längs diskontinuiteter som skär hålrumspärrer i sned vinkel kan reducera tangentialspänningarna. Normalrörelser hos enkla sprickor är små och har liten påverkan på spänningstillståndet. Stora sprickzoner begränsar termospänningarna vid temperaturförhöjning genom att medge stora normaldeformationer.

**Inverkan av grundvattentryck:** Vid förhöjda grundvattentryck reduceras den effektiva normalspänningen hos alla diskontinuiteter som har hydraulisk koppling till grundvattensystemet, vilket innebär att deras skjuvhållfasthet minskar. För diskontinuiteter som är belastade med stora skjuvspänningar kan rörelser utlösas som följd av skjuvbrott.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Ett antal metoder finns för att numeriskt analysera mekaniken hos bergmassor, uppbyggda av diskreta block, t ex DEM (Distinct Element Method) och DDA (Discontinuous Deformation Analysis) DDA. Flera bergmekaniska studier av rörelser och spänningar kring slutförvaret har gjorts med DEM-programmen UDEC (2D) och 3DEC (3D). Studierna har gjorts i både tunnelskalan och förvarsskalan.

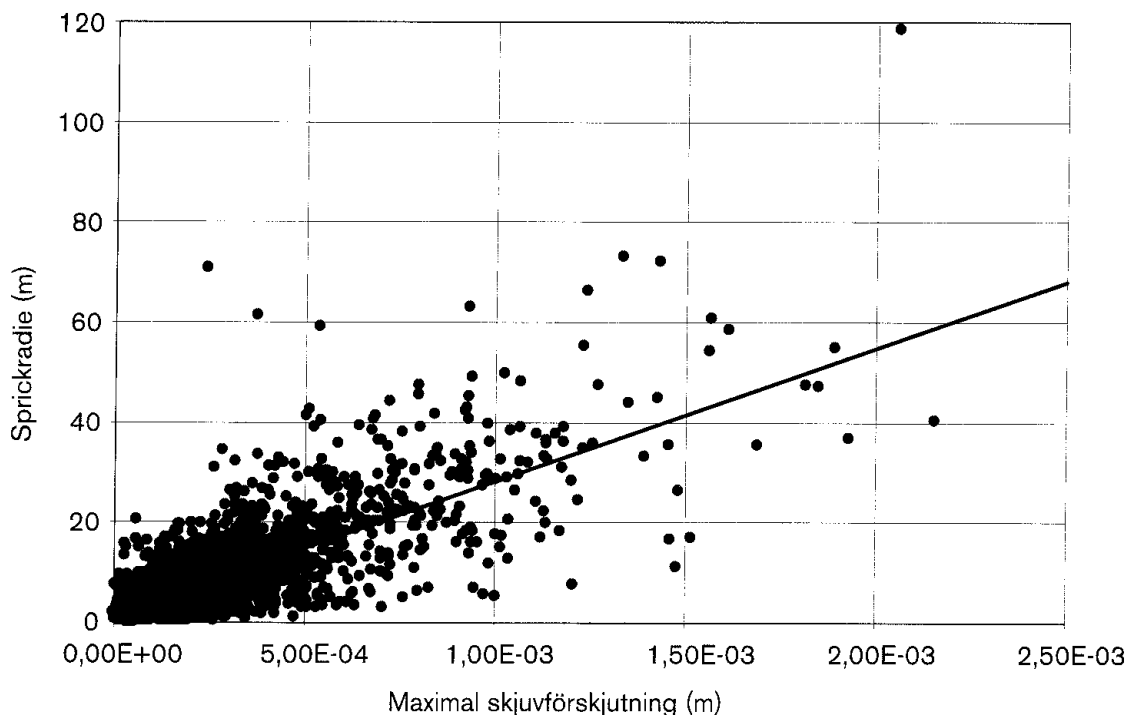
**Tunnelskalan:** Hökmark /1990/ och Hökmark och Israelsson /1991/ simulerade uttag av BMT tunneln i Stripa med UDEC och 3DEC. Sprickorna hade utsträckningar av 10 m–20 m och mekaniska egenskaper enligt laboratoriebestämningar som tidigare gjorts med sprickprover från Stripa gruva /Barton och Vik, 1988/. I UDEC-studien användes en komplicerad materialmodell liknande Bartons modell. I 3DEC studien användes en ideal elastoplastisk modell med brottkriterium enligt Coulomb. I 3DEC-studien simulerades också utgrävning av ett halvskaligt deponeringshål. De beräknade skjuvrörelserna uppgick som mest till 2–3 millimeter. Johansson et al /1991/ gjorde liknande beräkningar med UDEC och 3DEC för ett hypotetisk förvar i den finska berggrunden, men antog en större hållfasthet hos sprickorna och analyserade dessutom de termomekaniska effekterna av det deponerade bränslet. De maximala skjuvrörelserna uppgick till 3 millimeter. Shen och Stephansson /1990a/ fick i liknade beräkningar en största skjuvrörelse av 1.2 millimeter.

**Förvarsskalan:** Shen och Stephansson /1990b/ gjorde en 3DEC-studie av ett förvar i berg med mindre (1–3 km utsträckning), medelstora (2–8 km utsträckning) och stora sprickzoner (> 8km utsträckning). Den maximala skjuvrörelsen, 5,5 cm, erhöles vid markytan för en stor sprickzon vid glaciation med ett 3 km istäcke. Den termiska pulsen gav maximala skjuvrörelser av cirka 1 cm. I en senare liknande 3DEC-studie blev den maximala skjuvrörelsen hos stora sprickzoner cirka 2 cm för den termiska pulsen och cirka 8 cm för glaciation /Hansson et al, 1995/.

Rosengren och Stephansson /1990/ analyserade effekten av en islast över ett hypotetiskt förvar i Finnsjön med UDEC. Den maximala skjuvrörelsen uppgick till cirka 3 cm.

Israelsson /1996/ gjorde termomekaniska 3DEC beräkningar för ett hypotetiskt förvar i Äspö med nio brantstående stora sprickzoner som genomskär det hypotetiska förvarsområdet. Maximala skjuvrörelsen blev cirka 2 cm för pessimistiska antaganden om den termiska effekten. Ned till ett maximalt djup av cirka 200 m under markytan ökades zonernas apertur.

La Pointe et al /1997/ analyserade effekten av enstaka skalv av olika magnitud på olika avstånd från ett hypotetiskt förvar med sprickstruktur enligt en sprickstrukturmodell gällande för Äspö HRL. Analysen gjordes med Displacement Discontinuity programmet POLY3D för det pessimistiska antagandet att sprickorna är friktionsfria. För skalv av magnituden 6,1 som inträffar på ett avstånd av 2 km från förvaret blev den största skjuvdeformationen i förvarsområdet cirka 2 millimeter (figur 5-17). För att inducera en 0,1 m skjuvförskjutning i förvarsberget måste ett skalv av magnituden 7,5 inträffa på ett avstånd av mindre än 100 m och ett skalv av magnitud 8,2 på mindre än 1000 meters avstånd.



*Figur 5-17. Skjuvförskjutning hos sprickor i förvaret, orsakade av skalv av magnitud 6.1 på 2 km avstånd från förvaret, som funktion av sprickornas utsträckning. Spridningen kring regressionslinjen beror på de enskilda sprickornas avstånd till skalvet och på deras orientering /La Pointe et al, 1997/.*

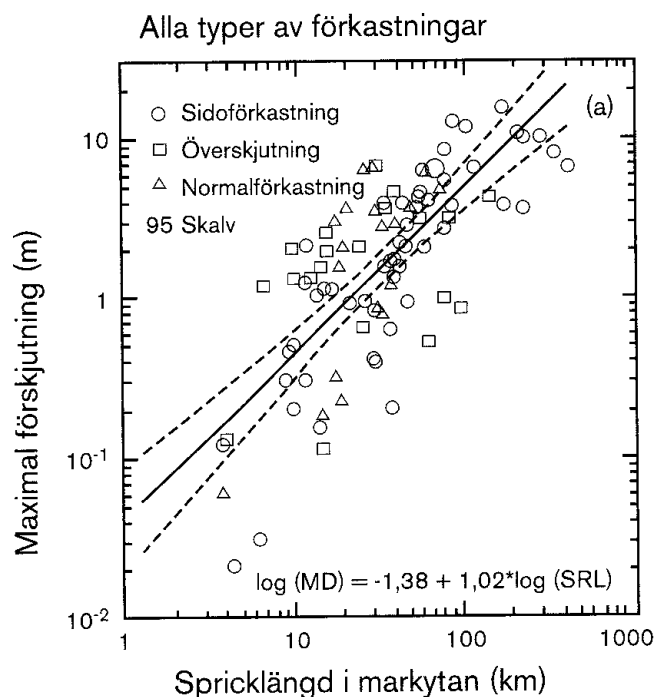
### Naturliga analogier

I internationell litteratur liksom i SKB:s arbeten finns avrapporteringar och sammanställningar av iakttagbara förskjutningar i fält. En relativt modern databas behandlar förkastningsrörelser i samband med jordskalv /se La Pointe et al, 1997/ efter Wells och Coppersmith, 1994. SKB:s insatser har fokuserats mot postglaciala förkastningar och neotektonik.

I jordskalvsdatabasen finns sammanställningar av förskjutningar för olika typer av förkastningar. Figur 5-18 visar en sådan sammanställning. Av figuren framgår att sambandet mellan förskjutningsbelopp och sprickstorlek är av samma typ som det teoretiskt härledda samband som visas i figur 5-16.

I norra Sverige har postglaciala förkastningsrörelser studerats i bl a Lansjärvsförkastningen. Strukturerna är tolkade att vara mycket gamla (hundratals miljontals år) och deras utsträckning i längd kan följas över 100 km. Förkastningarna anses vara orsakade av reaktiveringar i de redan befintliga strukturerna. Förkastningsbeloppen uppgår till 5 till 10 meter /se vidare Bäckblom och Stanfors, 1989; Stanfors och Ericsson, 1993/. Liknande iakttagelser har gjorts för normalförkastningar i Hanöbukten och på Nordsjön som tolkats utifrån marinseismiska undersökningar /se Wannäs och Flodén, 1994; Muir-Wood, 1995/.

Andra studier bygger på iakttagbara förskjutningar i geologiska strukturer (t ex strandlinjer) eller fossil som övertvårar förkastningar. En specialstudie över skjuvningar i enstaka sprickor har genomförts på hållar i Ölands kalksten. Kalkstenen innehåller fossil som delvis skjuvats av. Spricklängderna varierar men är av storleksordningen 10 till 100 m. De maximala och ackumulerade förskjutningsbelopp som iakttagits är cirka 0,10 m. Förskjutningarna har ägt rum under en period av cirka 450 miljoner år /se Milnes och Gee, 1992/.



**Figur 5-18.** Empiriskt samband mellan maximal förskjutning och iakttagbar längd hos förkastningsstruktur som varit aktiv i samband med ett jordskalv. Databasen består av 95 st jordskalv /från La Pointe et al, 1997/.

Sammanfattningsvis kan man konstatera att uppenbara korrelationer finns mellan de förskjutningsbelopp (skjuvning) som är uppmätta och strukturernas längder, där dessa förskjutningar ägt rum.

### **Tidsperspektiv**

Processen är kopplad till förändringar av belastningen och grundvattentrycket och äger rum under den tid den termiska lasten varierar (cirka 0–5000 år) och under den tid ett framtida istäcke tillväxer och drar sig tillbaka. Tidsperspektivet för seismiska rörelser beror på de statistiska magnitud/frekvenssamband som gäller för de tänkta förvarsbergen.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

**Osäkerheter i data:** En betydande osäkerhet finns när det gäller att bedöma de laster som förvarsberget kommer att utsättas för. Detta gäller den termiska lasten, där det finns osäkerheter när det gäller vilken effektiv E-modul som är relevant för förvaret och det omgivande berget.

**Osäkerheter i förståelse:** Vad gäller effekter av en kommande glaciation, råder osäkerhet om vilket som är det mest relevanta sättet att beskriva samverkan mellan islast och berggrund. Lasterna på förvarsberget blir t ex annorlunda om man modellerar jord-skorpan som elastisk platta på visköst medium /Rehbinder och Yakubenko, 1998/ jämfört med de laster man antagit i de analyser som hittills gjorts.

Det finns en osäkerhet om hur den enskilda diskontinuitetens topografi i olika skalor påverkar de mekaniska egenskaperna. Modeller för skalberoende finns, men inga resultat från storskaliga tester med icke-plana sprickor i inspänt berg. Den metod som allmänt tillämpas, nämligen att betrakta diskontinuiteter som helt plana, är förmodligen pessimistisk.

För stora sprickzoner finns konceptuella osäkerheter framförallt när det gäller spännings-deformations samband i skjuvriktningen. Det som allmänt antas, nämligen att rörelserna är bestämda av friktion, att friktionsvinkeln är liten och densamma i zonens hela utbredningsplan, innebär att sprickzonens skjuvdeformation överskattas.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

Processen kan ha betydelse för säkerheten på två sätt:

- 1) Skjuvrörelser hos diskontinuiteter som skär genom deponeringshål har direkt betydelse för säkerheten om rörelsen är så stor att buffert och kapsel skadas. För varje belastningsfall kan man, genom att tillämpa samband mellan utsträckning – skjuvdeformation, avgöra vilken utsträckning en spricka minst måste ha för att en skjuvdeformation ska överskrida säkerhetskriteriet. För de potentiella förvarsområdena finns statistiskt genererade spricknätverksmodeller som kan visa hur många kapselhålspositioner som genomskärs av sådan sprickor. Antalet skadade kapslar kan därför gränssättas. Det samband mellan utsträckning och maximal skjuvdeformation som visas i figur 5-16 är emellertid pessimistiskt. För att inte få onödigt pessimistiska gränssättningar bör därför mer realistiska samband, som tar hänsyn till att sprickor har ändlig utsträckning i alla riktningar, användas.



2) Normalrörelser kan i princip ha betydelse för säkerheten genom att transmissiviteten hos sprickor förändras vid aperturförändringar. Enskilda sprickors transmissivitet är känslig för normalspänningsvariationer, men bergmassans permeabilitet beror av påverkan på många sprickor med olika orientering och med komplexa konnektivitetförhållanden. Om vissa sprickor i systemet komprimeras eller vidgas bara marginellt vid belastningsförändringar, kan effekten av kraftiga transmissivitetsförändringar hos andra sprickor på bergmassans permeabilitet bli liten. Baserat på de mekaniska analyser som gjorts av sprickrörelser i närfältet kan man dra den allmänna slutsatsen att den påverkan på sprickorna i närfältet som man får i de olika scenarierna är av samma storleksordning som den som tidigare orsakats av borrning/sprängning av tunnlar och deponeringshål /se t ex Shen och Stephansson, 1996a/. Den permeabilitetsförändring man redan i initialtillståndet har i närfältsberget i förhållande till det ostörda berget kan därför fungera som en uppskattning av de permeabilitetsförändringar i närfältet man kan komma att få i de olika scenarierna. Teoretiska studier visar på permeabilitetsförändringar av högst 1 eller 2 storleksordningar kring hålrum i berg /se t ex Case och Kelsall, 1987/. I ZEDEX-försöket i Äspö HRL har man inte funnit några experimentella belägg för permeabilitetsökningar som orsakats av spänningssomfördelningar i samband med tunneluttaget /Olsson och Winberg, 1996/. I SR 97 bedöms därför kopplingen M-H vara sådan att man inte behöver beakta de mekaniska processernas inverkan på närfältsbergets retentionsegenskaper. Dessutom innebär de lastfall som beaktas i SR 97 i allmänhet att spänningsnivån i närfältet ökar, dvs sprickornas apertur minskar snarare än ökas. Något annorlunda förhåller det sig i berget mellan markytan och ner till cirka 200 m djup. Här får man under den termiska pulsen en systematisk reduktion av horisontalspänningarna, vilket ger en ökad permeabilitet i vertikalled. Avståndet till förvaret är emellertid så stort att inte heller detta beaktas i SR 97. Det ska ändå framhållas att den hydro-mekaniska kopplingen i berg inte är tillräckligt systematiskt undersökt för att slutgiltigt kunna avfärdas.

För direkta skjuvrörelser över deponeringshål kan man ställa upp kriterier. För närvarande tillämpas kriteriet att skjuvrörelser överstigande 0,1 m bör undvikas för att inte få kapselskador, se avsnitt 3.6.2. För permeabilitetsförändringar finns inga motsvarande generella kriterier.

**Basscenario:** I basscenariot sker sprickrörelser av tre orsaker: den termiska belastningen, lastförändringar i närfältet på grund av bentonitens svälltryck och på grund av att effektivspänningen i bergets sprickor minskar när grundvattentrycket återställs.

De termomekaniska numeriska beräkningar som gjorts har inte visat några skjuvrörelser som överstigit 0,1 m. De största skjuvrörelserna har dessutom skett längs sprickzoner av sådan storlek att de inte kommer att tillåtas att genomskära deponeringshål /Almén et al, 1996/. De analytiska beräkningar som gjorts för att bestämma termospänningarna visar att det maximala skjuvspänningstillskottet, som erhålls i en tunn horisontell skiva efter cirka 50 år, inte kommer att överstiga cirka 7 MPa /Probert och Claesson, 1997/. Detta är konsistent med, och en av orsakerna till, de små förskjutningar de numeriska termomekaniska analyserna givit. Kring hålrum blir skjuvspänningarna större, men i så små områden att bara små sprickor eller delar av större sprickor kan påverkas.

Bentonitens svälltryck har en liten lokal effekt på spänningstillståndet och har därför försumbar effekt på sprickornas rörelse /Shen och Stephansson, 1996a; Hökmark, 1996/.

Effekten av effektivspänningsreduktion som följd av att grundvattentrycket återställs har inte analyserats specifikt, men kan i princip gränssättas med hjälp av sambandet sprickutsträckning – skjuvdeformation för friktionsfria sprickor. Det friktionsfria delen av sprickan blir så liten att effekten kan försummas.

I SR 97 hänvisas till slutsatserna ovan, dvs att de gjorda studierna visar att inga skjuvrörelser hos sprickor som skär genom kapselhålspositioner förväntas vara större än 0,1 m i basscenariot.

**Klimatförändringar (Glaciation):** Flera olika möjligheter finns att beskriva samverkan mellan berggrund och istäcke, dels rakt under istäcket, dels i randområdena. Alla beskrivningarna ger olika belastningar på förvarsberget.

För de **statiska** lastfall som hittills analyserats i numeriska modeller har inga sprickrörelser som varit stora nog att skada kapslar erhållits. Detta är konsistent med det relativt lilla skjuvspänningstillskott som de beaktade lastfallen innebär. Skjuvkomponenten av spänningstillskottet är cirka 14 MPa på förvarsnivå, men med sådan orientering att spänningsanisotropin i själva verket reduceras /Hansson et al, 1995/. Också för andra rimliga statiska lastfall kan man, genom att betrakta utsträckning – deformationssamband av den typ som visas i figur 5-16, göra bedömningen att inga skjuvrörelser hos sprickor som skär genom kapselhålspositioner kommer att vara tillräckligt stora för att skada kapseln. Detta gäller även om man antar att sprickornas skjuvhållfasthet reduceras på grund av att grundvattnet trycksatts med en vattenpelare som är lika med islastens tjocklek.

**Dynamiska** effekter som uppstår i samband med att isen drar sig tillbaka behandlas i jordskalvscenariot.

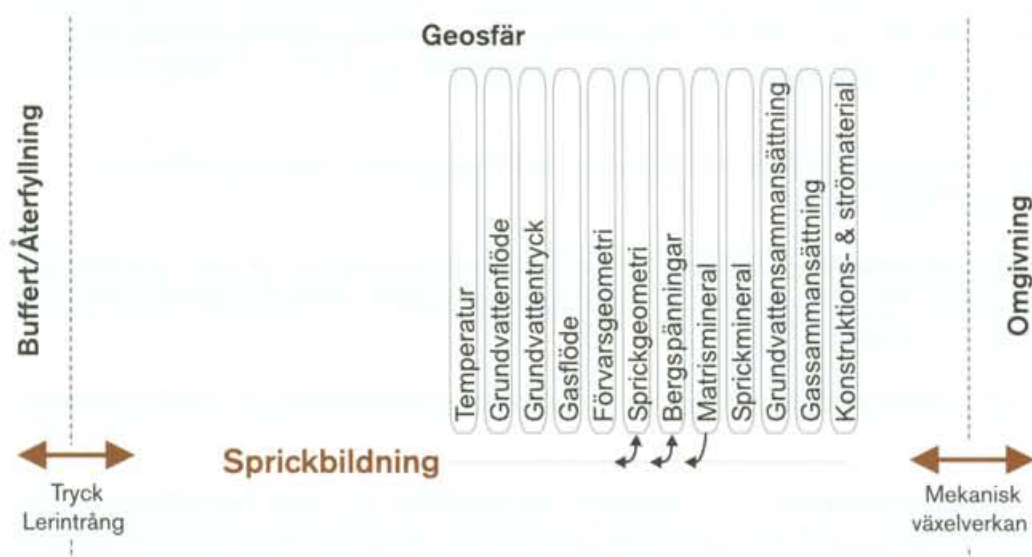
I SR 97 hänvisas till slutsatserna ovan, dvs att de gjorda studierna visar att inga skjuvrörelser hos sprickor som skär genom kapselhålspositioner förväntas vara större än 0,1 m.

**Jordskalv:** Uppskattningar av den förväntade frekvensen av skalv av olika magnitud i olika delar av Sverige finns i litteraturen /Kijko et al, 1993/ och kan omsättas till frekvens per areaenhet kring de tänkta förvarsområdena.

I jordskalvsanalyserna i SR 97 fördelas skalvens centrum statistiskt (små skalv) och deterministiskt (medelstora och stora skalv) kring förvarsberget /La Pointe et al, 1998/. För de olika förvarsbergen skapas statistiska spricknätverksmodeller /Follin och Hermanson, 1997/ som visar antalet och storleksfördelningen av de sprickor som kommer att genomskära deponeringshål.

Genom att tillämpa samband (erhållna med programmet POLY3D så som beskrivs ovan under modellstudier) mellan magnitud, avstånd till skalvcentrum, sprickutsträckning och skjuvdeformation, på ett representativt urval kapselskärande sprickor får man statistik som visar förskjutningar längs dessa sprickor. Om sambanden tillämpas upprepade gånger i enlighet med den jordskalvstatistik som upprättas enligt ovan för de olika förvarsområdena, kan de ackumulerade effekterna av alla jordskalv som förväntas inom de närmsta 100 000 åren beräknas. I SR 97 används sedan resultatet för att uppskatta antalet kapslar som kan komma att skadas av jordskalv.

## 5.6.5 Sprickbildning



Figur 5-19. Sprickbildning.

### Överblick och allmän beskrivning

När prover av intakt berg belastas stegvis, dvs utsätts för allt större spänningar, får man deformationer som till att börja med är elastiska, men som vid ökande belastning kommer att ha också ett icke-reversibelt, eller plastiskt, inslag. Vid långt driven deformation uppnås en största spänning vilken är provets hållfasthet under de givna förutsättningarna. Efter ytterligare någon deformation kan provet fragmenteras så att den återstående lastbärande förmågan, residualhållfastheten, uteslutande beror av friktion mellan de bildade fragmenten.

Den fundamentala mekanismen i processen, tillväxten av mikrosprickor, har beskrivits av A A Griffit /Griffith, 1924/. Tillämpning av Griffith's ursprungliga brotteori förutsätter förekomsten av godtyckligt orienterade elliptiska hålrum i ett kontinuerligt elastiskt medium. Teorin säger då att draghållfastheten är en åttondel av den enaxliga tryckhållfastheten, vilket är approximativt sant för de flesta kristallina bergarter. Teorin är i övrigt svår att tillämpa för att makroskopiskt beskriva brott hos intakt berg under allmänna spänningsantaganden, varför man i praktiken använder sig av empiriska brottkriterier, t ex Hoek-Browns kriterium.

Sprickbildningsprocessen är alltså beroende av spänningstillståndet, men startar i själva verket vid lägre laster än den egentliga brottslasten. Berg som befinner sig i ett spänningstillstånd motsvarande cirka 80 procent av brottslasten kan, utan ytterligare lastökning, komma att fragmenteras efter någon tid om spänningsnivån bibehålls /Martin, 1994/. Fenomenet kan observeras när tunnlar och andra hålrum tas ut i berg på stort djup där primärspänningarna ger upphov till stora spänningskoncentrationer. Intill hålrumsväggarna är tangentialspänningarna stora och den radiella inspänningen liten, vilket kan ge bergutfall på grund av uppsprickning parallellt med hålrumsväggen (smällberg).

De mekanismer som styr tillväxten av mikrosprickor, styr i princip också propagering av befintliga sprickor. I inspänt berg kan propagering av enskilda sprickor ske dels genom att sprickan utbreder sig i sitt eget plan genom skjuvbrott, dels genom uppsprickning i vinkel mot det egna planet genom dragbrott vid sprickans periferi, s k "splay cracks" /Scholz, 1990/.

**Inverkan av bergspänningar:** Processen är direkt kopplad till spänningstillståndet enligt beskrivningen ovan.

**Påverkan på bergspänningar:** Brott i intakt berg innebär att den last som inte kan tas av de plastiserade delarna omfördelas. Kring hålrum innebär detta att spänningsmaxima förskjuts från periferin ut i berget.

**Påverkan på sprickgeometri:** Processen innebär definitionsmässigt att sprickgeometrin påverkas.

**Inverkan av sprickgeometri:** I de områden där processen äger rum i någon betydande omfattning, nämligen intill deponeringshål och tunnlar, kan den lokala sprickgeometrin vara avgörande. Tangentiellt orienterade sprickor kan ge spänningskoncentrationer mellan spricka och hålrum, vilket ökar risken för brott. Sprickor som skär hålrummens periferi i sneda vinklar kan ge spänningsreduktioner, vilket minskar risken för brott.

**Inverkan av matrissammansättning:** Bergarten har betydelse för hållfastheten. För de bergarter som undersökts i Äspö varierar den laboratoriebestämda enaxliga tryckhållfastheten mellan 170 MPa och 260 MPa /Stille och Olsson, 1996/.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Förloppet med begynnande och sedan tilltagande plastisering, brott och fortsatt deformation till provets residualhållfasthet har uppnåtts, är stadier i sprickbildningsprocessen hos intakt berg, och har beskrivits i studier av bland annat Martin /1994/ och Li /1993/. Vid det inledande elastiska skedet komprimeras först provets mikrosprickor. Senare vidtar en stabil tillväxt av mikrosprickorna i den största huvudspänningens riktning. Innan brott inträffar, dvs innan gränsen för provets hållfasthet nåtts, finner man ett skede med instabil tillväxt av mikrosprickorna, endera som tidigare i största huvudspänningens riktning eller så att skjuvsprickor bildas genom att flera växande mikrosprickor samverkar och sammansmälter. Hur spricktillväxten sker beror av bergegenskaperna och av lastförhållandet: vid enaxlig belastning sker den instabila tillväxten och den makroskopiska fragmenteringen axiellt, dvs i största huvudspänningens riktning. Hos inspända prover kan skjuvsprickor bildas.

Om en befintlig spricka propagerar, och i vilken riktning propageringen i så fall sker, beror av det lokala spänningsfältet vid sprickperiferin /Scholz, 1990/. Numeriska modeller för prediktering av propageringsförlopp i elastiska medier, baserade på tillämpning av töjningsenergikriterier, har prövats i 2-dimensionella närfältsanalyser /Shen och Stephansson, 1996b/. Resultaten visade att processen förutsätter höga spänningsnivåer och kraftig spänningsanisotropi. Om förhållandet mellan största och minsta primära huvudspänning var större än 4 skedde propagering och sammansmältning av enskilda sprickor runt cirkulära hålrum.

Johansson et al /1995/ studerade spänningstillståndet efter uttag av tunnel och deponeringshål i området kring skärning mellan tunnel och deponeringshål för olika antaganden om de lokala primära bergspänningarna. Studien gjordes numeriskt med ett 3D

kontinuum-program, där berget antogs vara elastiskt. Området kring deponeringshålet indelades sedan i kategorier med avseende på hur spänningstillståndet förhöll sig till de olika stadierna i utvecklingen av spröda brott som identifierats vid URL /Martin, 1994/. Resultatet visade att, för primärspänningar ungefär motsvarande förhållanden på 1000 m djup, bara obetydliga områden var i direkt brotttillstånd, medan något större områden (max djup cirka 150 millimeter från deponeringshålsväggen) var i ett tillstånd av instabil spricktillväxt, dvs med möjlighet för smällberg. Ett ännu något större område (till ett maxdjup av cirka 400 millimeter) var i ett tillstånd där sprickbildning initierats (stabil spricktillväxt). För spänningar motsvarande 500 m djup erhöles ingenstans spänningsnivåer motsvarande direkt brott eller instabil spricktillväxt. Vid alla analyser antogs den mest ogynnsamma tunnelorienteringen, dvs med tunnelaxeln vinkelrät mot den största primära huvudspänningen.

Hökmark /1996/ gjorde termomekaniska elastiska 3D-beräkningar av spänningstillståndet kring deponeringshål. Analysen visade att de områden som befann sig i potentiellt brotttillstånd efter uppvärmning inskränkte sig till små volymer i skärningen tunnel/deponeringshål och till ännu mindre områden längs borrhålens sidor. Det maximala djupet från deponeringshålsranden var cirka 300 millimeter.

Vid URL i Kanada fick man spröda brott med bergutfall utefter nästan lodräta linjer i två vertikala 600 millimeter hål som borrats i golvet av en tunnel i sprickfattigt berg med stora primärspänningar. I den allra översta delen av hålen, i höjd med tunnelns EDZ, fick man dock inga brott. Vid en följande uppvärmningsfas med maxtemperaturer mellan 80 och 90 °C vid borrhålsväggarna utvidgades brotten till att bli sammanhängande ända ner till borrhålsbottnarna, fortfarande med undantag av den del som hörde till tunnelns EDZ /Martino och Read, 1995/. Djupet av de spröda brotten var cirka 50 millimeter, räknat från borrhålsväggarna.

### **Tidsperspektiv**

Se processen rörelse längs befintliga sprickor.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

En betydande och viktig osäkerhet finns när det gäller att bedöma de laster som förvarberget kommer att utsättas för. Se motsvarande avsnitt under processen rörelse längs befintliga sprickor.

Det är osäkert om laboratoriebestämda hållfasthetsvärden alls är tillämpliga *in situ* för intakt berg intill t ex tunnelväggar. På grund av den spänningshistoria som berget går igenom när tunnelfronten passerar kan processen med initiering av mikrosprickor ha ett annat förlopp än i laboratoriet. Detta kan leda till en överskattning av hållfastheten /Martin, 1994/. Även om man kan uppskatta vilka brottlaster som verkligen gäller, har man en dålig konceptuell förståelse av progressiva spröda brott, och kan därför inte utifrån beräkningar göra prediktioner av omfattningen av brott, t ex invid deponeringshålsväggar.

De program för modellering av sprickpropagering som prövats är 2-dimensionella, vilket förmodligen innebär att omfattningen av processen överskattas. Det är också osäkert vilken potential för stora förskjutningar en spricka kan ha som skapats genom sammansmältning av två icke perfekt koplanara sprickor. Den sprickutsträckning som gränssätter den möjliga förskjutningen längs en sådan spricka, är rimligen väsentligt mindre än summan av utsträckningarna hos de båda ursprungliga sprickorna.

De brottmekanikmodeller som används i programmen för att beskriva sprickpropagering har utvecklats för tillämpning på andra typer av material än berg, t ex metaller, och tar därför inte hänsyn till möjlig förekomst av inbyggda svagheter.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

Processen kan ha betydelse för säkerheten på tre sätt:

1. Sprickor som skär genom deponeringshål propagerar och sammansmälter med andra sprickor så att sprickor av så stor utsträckning bildas att aktuell eller kommande belastning kan generera skjuvdeformationer. För att skjuvdeformationen ska kunna påverka en kapsel måste kapselhålet befinna sig i närheten av sprickans centrum. Vid sprickans kanter är skjuvdeformationen noll oavsett sprickans storlek.
2. Brott vid deponeringshålens rand ger mekaniska effekter i form av volymexpansion av det plastiserade berget så att bufferten komprimeras och skadar kapseln. Man bör observera att både utbildning av brottet och effekterna, i form av volymexpansion, hämmas av bentonitens svälltryck. I de modellstudier och experimentella studier som beskrivs ovan har detta inte beaktats.
3. Brott (nybildning av sprickor) intill deponeringshålsväggen ger förändringar av permeabiliteten i området mellan deponeringshål och deponeringstunnel. Sådana permeabilitetsförändringar finns förmodligen redan i initaltillståndet, speciellt om tunnarna är vinkelräta mot den största primära huvudspänningen. Denna möjliga hydromekaniska koppling beaktas inte i SR 97 (se motsvarande under processen 'reaktivering').

**Basscenario:** De studier som gjorts visar att de spänningar som erfordras för propagering av befintliga sprickor inte kommer att förekomma annat än i små områden närmast tunnlar och deponeringshål /Shen och Stephansson, 1996b/. Antalet sprickor med tillräckligt stor utsträckning för att ge skjuvförskjutningar större än 0,1 m (kriteriet för undvikande av kapselskador), och med kapselhål i närheten av sprickcentrum kommer därför inte att påverkas.

Den termiska belastningen ger en utvidgning av de områden kring skärningen mellan tunnel och deponeringshål som redan befinner sig i eller nära brotttillstånd. De gjorda studierna visar att ökningen blir liten och att effekten, i form av kompression av bufferten, förmodligen kan försummas.

I SR 97 bedöms, med hänvisning till studierna ovan, inga kapslar komma att skadas på grund av sprickpropagering eller på grund av brott i berget närmast deponeringshålen i basscenariot.

**Klimatförändringar (Glaciation):** Om spänningarna och spänningsanisotropin som genereras av en islast är tillräckligt stora kan, i princip, följden bli att sprickor också på stora avstånd från förvarets hålrum kan propagera och sammansmälta. I de analyser som hittills gjorts har emellertid de spänningstillskott som generas av islaster inte medfört ökad spänningsanisotropi annat än i hålrummens närhet /se Rosengren och Stephansson, 1990; Hansson et al, 1995/. I SR 97 bedöms därför glaciationer inte komma att leda till att antalet kapselskärande sprickor med stor utsträckning och med kapselhål i närheten av sprickans centrum ökar.

Omfattningen av brott med uppsprickning i närheten av kapselhålet blir förmodligen mindre än för basscenariot /Shen och Stephansson, 1996a/. Den beräknade eller uppskattade omfattningen beror dock på hur islasten representeras. Johansson och Hakala

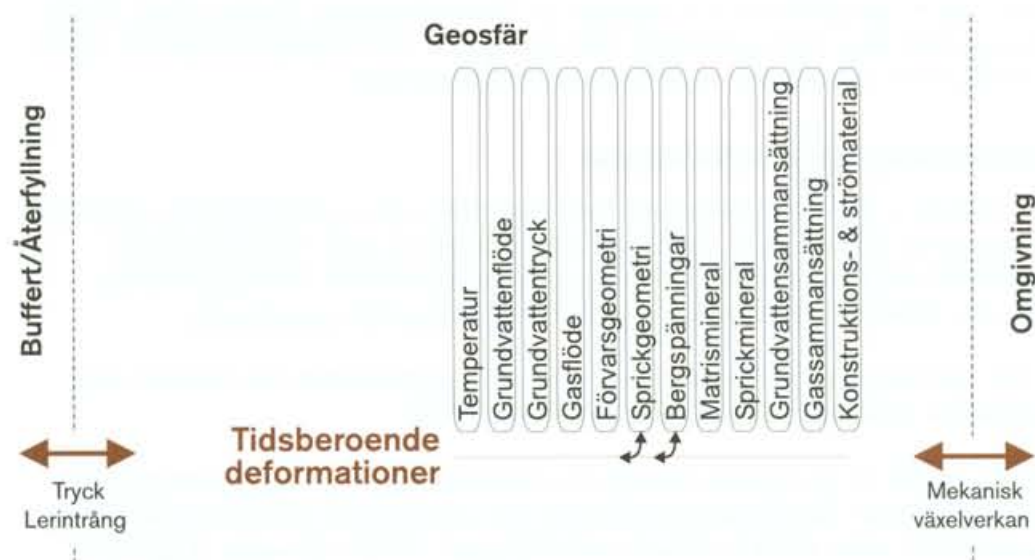


/1995/ tittade på effekterna av mycket stora spänningar. Vid spänningsnivåer som kraftigt överstiger de som i studierna ovan antas skapas av en glaciation, var området kring skärningen mellan tunnel och deponeringshål i brotttillstånd. I tunnelgolvet var området mellan deponeringshålen i ett tillstånd av instabil spricktillväxt. I höjd med kapslarna var delar av deponeringshålsväggarna i ett spänningstillstånd motsvarande stabil spricktillväxt. Man kan förmoda att om ett brott hade uppstått, hade det fått en omfattning ungefär som det som uppstod vid en liknande spänningssituation vid URL i Kanada (se ovan under experimentella studier), dvs spröda brott intill ett begränsat djup. Brott av denna omfattning bedöms inte komprimera bufferten på ett sätt som skadar kapseln.

I SR 97 bedöms, med hänvisning till studierna ovan, inga kapslar komma att skadas på grund av sprickpropagering eller på grund av brott i berget närmast deponeringshålen vid en glaciation.

**Jordskalv:** Frekvens/magnitudsamband finns (se processen rörelse längs befintliga diskontinuiteter) men inga resultat finns från studier som visar konsekvenser i form av sprickbildning för skalv av olika magnitud och på olika avstånd från förvaret. Man kan dock förutsätta att den mekaniska påverkan på kapslarna som orsakas av sprickbildning är underordnad den påverkan man får på grund av rörelser i befintliga sprickor. I SR 97 görs därför bedömningen att jordskalvscenariot är tillräckligt väl täckt av sprickrörelseanalysen som beskrivs under processen 'reaktivering'.

### 5.6.6 Tidsberoende deformationer



Figur 5-20. Tidsberoende deformationer.

#### Överblick

Alla rörelser i berget omfattas av de processer som beskrivits tidigare och påverkas följaktligen av samma variabler. Tidsberoende deformationer är därför i egentlig mening inte en egen process utan den sammantagna effekten av samtidigt pågående lastförändringar, förändringar i materialegenskaper, rörelse i intakt berg, rörelser längs befintliga sprickor och sprickbildning.



## **Allmän beskrivning**

Tidsberoende deformationer i förvarsberget kan vara av två huvudtyper:

- 1) Lasterna på förvarsberget förändras på grund av förskjutningar som genereras på stort avstånd från förvarsberget. Den tektoniskt orsakade kompressionen av det inre av den baltiska skölden kan antas motsvara en töjning av  $10^{-11}$  per år, medan den töjning som beror av den ännu pågående landhöjningen kan uppgå till  $10^{-9}$  per år /Muir-Wood, 1993/. En töjning av  $10^{-9}$  per år motsvarar en spänningstillväxt av 5 MPa på 100 000 år om man approximativt betraktar töjningen som enaxlig kompression och sätter E-modulen till 50 GPa. Tidsberoendet gäller lastförändringen, varför de deformationer som uppstår i förvarsberget inte är i egentlig mening tidsberoende (se inledningen). De processer, sprickrörelse och sprickbildning, som kan ha direkt betydelse för säkerheten äger rum på samma sätt som vid andra lastfall. Den ringa spänningstillväxten och det långa tidsperspektivet gör att effekter av tektoniska förskjutningar inte beaktas i SR 97.
- 2) De mekaniska egenskaperna i förvarsberget förändras med tiden så att rörelser sker på grund av redan verkande spänningar (kryprörelse). Denna typ av rörelser är de som i inledningen egentligen avses med tidsberoende deformationer. Förändringarna kan bero direkt på spänningstillståndet, t ex instabil tillväxt av mikrosprickor i intakt berg. Ojämn fördelning av skjuvspänningar längs sprickplan i alla skalor kan leda till initiering och tillväxt av mikrosprickor och efterhand till lokal plastisering i anslutning till spänningskoncentrationer vid ojämnheter i sprickytor /Pusch och Hökmark, 1993/. Förändringarna kan också gälla förekomst av och egenskaper hos sprickfyllnadsmineral.

Drivkraften bakom kryprörelser är förekomst av skjuvspänningar. Endera pågår därför deformationen tills inga skjuvspänningar finns kvar, eller tills skjuvspänningarna reducerats och omfördelats till delar av systemet som inte plastiseras.

## **Modellstudier/experimentella studier**

Rörelsen i kupolen i SFR har mätts med extensometrar sedan sprängningarna avslutades 1985. De uppmätta rörelserna är dock osystematiska och så små i förhållande till extensometrarnas noggrannhet att tolkningen, liksom prediktion av möjlig fortsatt rörelse, är svår. Dessutom är kupolen förstärkt med bultar och sprutbetong.

Resultat från plattbelastningsförsök på berg visar att kryptöjningen vid konstant last avtar logaritmiskt med tiden /Pusch och Hökmark, 1993/.

En numerisk modell av en cirkulär tunnel där bergmaterialet närmast tunnelperiferin antogs ha tidsberoende deformationsegenskaper gav en maximal radiell kryprörelse av 0,3 millimeter efter cirka 2000 år /Pusch och Hökmark, 1993/. Eloranta et al /1992/ fann att det skulle ta cirka  $10^9$  år för deponeringshålväggen att röra sig radiellt 10 millimeter förutsatt att berget runt deponeringshålet är av god kvalitet. Pusch /1996/ gjorde en uppskattning av möjlig tidsberoende deformation av deponeringshål genom att anta att bergets krypegenskaper kan representeras som en logaritmiskt med tiden minskad E-modul. Uppskattningen gav en maximal diameterminskning av 12 millimeter efter 10 000 år.

## **Naturliga analogier**

Naturliga analogier visar på maximala skjuvrörelser av maximum 0,1 m för 10–100 m långa sprickor under en tid av 450 år (se avsnitt under 'reaktivering')

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Osäkerheterna är stora och gäller både bedömningen av de laster som kommer att verka på förvarsberget och den konceptuella beskrivningen av tidsfördöjda deformationer i intakt berg, längs sprickor och i bergmassan.

Flera olika typer av reologiska modeller för kontinuerliga medier finns, som i princip skulle kunna användas för bergmassan eller för det intakta berget. De olika modellerna ger emellertid väsentligt olika förlopp, och en riktigt hållbar motivering för någon specifik modell saknas, även om de experimentella resultaten talar för att deformationen avtar starkt med tiden.

För tidsberoende deformationer hos sprickor finns inga samband. Därmed finns inte heller någon modell för hur tidsberoende deformationer fördelas mellan diskontinuiteter och intakt berg.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

Om man antar att alla betydelsefulla rörelser sker längs sprickor blir den yttersta konsekvensen av en omfattande kryprörelse som ägt rum under lång tid att inga sprickor längre tar några skjuvspänningar. Bedömning av antalet skadade kapslar beror då bara på hur många kapselhål som genomskärs av sprickor med tillräckligt stor utsträckning för att den maximala skjuvdeformationen utan friktion ska överstiga 0,1 m. Inget är känt om tidsskalan för en sådan hypotetisk utveckling, men spänningstillståndet i berget idag talar för att sprickorna tar skjuvspänningar och att utvecklingen därför, om den alls finns, är utomordentligt långsam. Tidsskalan för de naturliga analogierna är enligt ovan hundratals miljoner år.

Om man pessimistiskt antar att berget kring kapselhålen i sin helhet deformeras tidsberoende som ett kontinuum enligt reologisk modell som ger rörelse så länge det finns skjuvspänningar, kommer rörelsen att upphöra först när bufferten har komprimerats så att svälltrycket blivit lika stort som bergets medeltrycksspänning. Om medeltrycksspänningen vid kapselhålet är 20 MPa, vilket är något mer än medeltrycksspänningen vid Aberg, Beberg och Ceberg idag, ökas därför trycket på kapseln till att bli lika stort. Denna tryckökning räcker inte för att skada kapseln. I själva verket blir medeltrycksspänningen vid förvarsdjupet mindre än 20 MPa om bergmassan verkligen deformeras enligt ovan, alltså som en trög vätska. Spänningstillståndet blir då hydrostatiskt med medeltrycksspänning som motsvarar bergets egentyngd, dvs ca 14 MPa.

Om man gör samma antagande för berget kring de återfyllda tunnarna, dvs förutsätter att deformationerna pågår så länge det alls återstår några skjuvspänningar, gäller i princip samma sak som för deponeringshålen. När trycket i återfyllningen är lika med medeltrycksspänningen i berget och all valvverkan kring tunnelperiferin är förlorad upphör rörelserna. Skillnaden är att återfyllningen inte, som den kompakterade bentonitbufferten, kan mobilisera mothåll genom ett svälltryck som snabbt ökar vid kompression. Hos återfyllningen är svälltrycket försumbart och konvergensen begränsas därför av återfyllningsmaterialets rena kompressionsegenskaper, som är beroende av sammansättning och packningsgrad. Kompressionsegenskaperna vid långt driven kompression under höga tryck är inte systematiskt undersökta, men det är förmodligen pessimistiskt att anta att återfyllningen kan komprimeras med 10 procent, vilket skulle innebära att återfyllningens porositet reduceras med ca en tredjedel. En tioprocentig volymsreduktion innebär en femprocentig reduktion av tunnelradien, dvs ca 10 cm.

Antagandet att berget kan deformeras som ett visköst medium tills all valvverkan för-lorats och alla skjuvspänningar utjämnats måste betraktas som mycket pessimistiskt. Om denna typ av rörelse alls äger rum är det troligare att den avstannar redan när någon del av skjuvspänningarna kring hålrummen relaxerats, och att därför konver-gensen blir liten. Effekterna på spricksystemet kring hålrummen och därmed närfälts-berget's permeabilitet är inte systematiskt undersökta, men i huvuddrag kan man för-moda att axiellt riktade sprickor sluts, eftersom det radiella trycket ökar, och att radiellt riktade sprickor öppnas eftersom de tangentiella spänningarna minskar. Omfattningen och effekten av dessa sprickviddsförändringar är okänd men kan, tills noggrannare analyser gjort, antas vara ungefär likvärdig med den störning som redan finns på grund av den störda zonen (EDZ).

Också för de laster som kommer att gälla vid en glaciation kan man gränssätta conse-kuenserna för kapselintegriteten av en kryprörelser i bergmassan. Om man hypotetiskt antar att kryprörelser av sådan omfattning att bergmassans skjuvspänningar försvinner hinner äga rum under den tid som en glaciationen varar, kan man tillämpa samma resonemang som ovan. Spänningstillståndet i berget är då hydrostatiskt, dvs spänningar-nas är lika i alla riktningar och bestäms av bergmassans egentyngd (ca 14 MPa) och islasten (ca 30 MPa). Trycket mot kapseln ökar alltså till ca 44 MPa. Detta är av samma storleksordning som det tryck man finner om man förutsätter att inga kryprörelser sker. Utan kryprörelser konvergerar inte kapselhålen, vilket betyder att bentonitbufferten inte komprimeras och därför behåller sitt ursprungliga svälltryck (ca 7 MPa). Islasten verkar då istället på kapseln genom ett förhöjt porvattentryck (totalt ca 37 MPa) så att total-trycket på kapseln blir ca 44 MPa.

Med hänvisning till de gjorda studierna, de naturliga analogierna och överslagsräkningar enligt ovan, bedöms inte effekterna av kryprörelser ha någon betydelse för förvarets säkerhet i SR 97.

## **5.7 Kemiska processer**

### **5.7.1 Inledning**

Den geokemiska situationen i svensk berggrund är generellt mycket stabil. Reaktions- och transportprocesser pågår ständigt men leder i allmänhet till förändringar bara i ett mycket långt tidsperspektiv. Reaktionen förekommer bland annat mellan olika kompo-nenter i grundvattnet, mellan vatten och sprickmineral och mellan vatten och berg-matris. Grundvattenflödet svarar för transport av reaktanter och reaktionsprodukter till respektive från reaktionerna. Det flödande grundvattnet leder också till en blandning av olika grundvattentyper från olika områden i geosfären.

Ramarna för utvecklingen ges av in- och utströmning av vatten från/till biosfären, samt av utbyte med mycket djupt liggande grundvatten. Utvecklingen styrs därmed bland annat av nederbörds mängder och marknära kemiska förhållanden. Den geokemiska utvecklingen på en förvarsplats bestäms således av:

- Dagens geokemiska situation.
- Transport- och reaktionsprocesser i geosfären.
- Växelverkan med omgivningen, framför allt av in- och utflöden från/till biosfären som i sin tur beror av klimatet.

Dagens geokemiska situation är på motsvarande sätt resultatet av tidigare klimatförhål-landen, transport- och reaktionsprocesser.

Stora förändringar i grundvattnets kemiska sammansättning orsakas främst av långsiktiga klimatförändringar. Med klimatet ändras nederbörd och framför allt flödesförhållandena och detta kan leda till märkbara effekter på grundvattnets sammansättning. Effekter av klimatförändringar diskuteras i klimatscenariot. I basscenariot ger framför allt landhöjningen långsiktiga effekter på flödesmönster och därmed grundvattensammansättningen.

### **Historisk utveckling**

För att kunna ge en bra beskrivning av de geokemiska förhållandena framåt i tiden krävs en förståelse av den historiska utvecklingen dvs de förhållanden som givit upphov till dagens situation. Mycket av forskningen kring den geokemiska utvecklingen är därför inriktad mot att förstå den historiska utvecklingen.

### **Betydelse för förvarets säkerhet**

Grundvattnets sammansättning är i kombination med grundvattenflödet av stor betydelse för förvarets funktion, både kort- och långsiktigt. Växelverkan mellan ingenjörbarriärerna och grundvattnet bestämmer hur länge det använda bränslet kommer att förbli isolerat. Även i en situation då isoleringen brutits har grundvattnet en avgörande betydelse för upplösning och transport av radioaktiva ämnen i bränslet /SKB, 1995/.

Mängden löst syre i vattnet och mängden sulfid som kan komma i direkt kontakt med kopparkapseln har betydelse för kopparkorrosion. Dessa ämnen korroderar kapseln på olika sätt. En attack av syre åstadkommer gropfrätning medan sulfidkorrosion fördelas jämt över hela ytan. Därför är reducerande förhållanden i grundvattnet ett krav för djupförvarsplatsen, dvs det får inte finnas något löst syre i vattnet. Övriga konstituenten i grundvattnet påverkar inte kapselns integritet, förutom en kombination av extremt höga salthalter och lågt pH.

För bufferten (bentonit) är det nödvändigt att grundvattnet innehåller en minimihalt av lösta salter. Förekomsten av tvåvärda katjoner är väsentlig för att bentoniten inte ska bilda kolloider. Summan av halterna av kalcium och magnesium bör överstiga 4 mg/l. Mycket höga salthalter kan eliminera bentonitens svällande förmåga och därmed omindetgöra dess funktion som diffusionsspärr mellan kapseln och berget. Denna effekt blir märkbar vid en salthalt av cirka 50 000 mg/l. För återfyllningen som består av en blandning okompakterad bentonit och sand eller bergkross har lägre salthalter också betydelse. Därför väljs bentonit/ballast proportioner med hänsyn till rådande salthalter, se avsnitt 4.1.1.

För radionuklidtransport är vattnets variabler pH och Eh viktiga. Under reducerande förhållanden (inget löst syre) förekommer många av de farligaste nukliderna i en reducerad form med mycket låg löslighet. Vid neutralt pH är lösligheten lägre än under sura eller alkaliska förhållanden. I typiska grundvatten råder reducerande förhållanden och pH är neutralt. Vattnets totala salthalt påverkar retentionen av svagt sorberande nuklider.

Dessutom är vattnets innehåll av kolloider och mikrober av stor betydelse för nuklidtransport eftersom dessa partiklar kan fungera som bärare för radionuklider. Vid höga halter kommer starkt sorberande nuklider att kunna fastna på kolloider och mikrober i stället för på sprickytorna och därmed transporteras med grundvattenflödet. I undersökta grundvatten har halten av kolloider varit så låg att denna transportmekanism saknat betydelse.

### **Tidsperspektiv**

Förenklat kan man urskilja tre tidsskalor i den geokemiska utvecklingen kring ett djupförvar.

**I ett kort tidsperspektiv**, 10–100 år, bestäms de kemiska förhållandena av störningar i den naturliga situationen som orsakas av förvaret självt.

**I ett längre tidsperspektiv**, upp till tiotusentals år, är dagens naturliga förhållanden av grundvattenströmning och blandning dominerande.

**I ett mycket långt tidsperspektiv**, längre än tiotusentals år, påverkas grundvattnets sammansättning också av dess reaktioner med bergets mineral samt av klimatförändringar.

### **Jämvikt vatten/bergmineral**

Vattnets tänkta sammansättning, om det vore i jämvikt med berget, kan beräknas med termodynamiska data. Data existerar för de flesta mineralfaser, även om dessa ibland är behäftade med stora osäkerheter. Osäkerheterna överskuggas dock ofta av det faktum att den kemiska miljön i berget sällan uppvisar jämvikt eftersom de flesta reaktioner är mycket långsamma. I allmänhet är jämvikt en situation som systemet grundvatten/mineral strävar mot men aldrig uppnår. Avvikelsen från jämvikt är helt beroende av vattnets flödes- och blandningsförhållanden /Plummer et al, 1991; Laaksoharju och Wallin, 1997/. Inte ens i stagnanta partier, där diffusionen dominerar över flödet som transportprocess, kommer alla reaktioner att uppnå jämvikt. /Gascoyne et al, 1987; Frape och Fritz, 1987/.

### **Blandningsförhållanden**

Den stora heterogeniteten i bergets vattenledande förmåga och tidsberoende förändringar i tryckförhållandena gör att vattenflödet i berggrunden kan variera kraftigt i tid och rum. Detta har i allmänhet större betydelse för vattnets sammansättning än tidigare reaktioner mellan vatten och bergmineral. Ett vattenprov kan innehålla en andel som varit isolerat från atmosfären i över en miljon år och en andel som infiltrerat berget i modern tid /Laaksoharju et al, 1995/. Vattnet uppvisar således ett spektrum av ursprungstyper som blandats i olika proportioner. Blandningarna är inte kemiskt i jämvikt utan reaktioner mellan komponenter i lösning samt utfällning och upplösning av fasta faser pågår ständigt. För att kunna beskriva och kvantifiera dessa reaktioner måste man känna till förhållandena som rått då olika vattentyper bildades och vilken kemisk sammansättning dessa har haft /Laaksoharju och Wallin, 1997/. Det är mycket svårt att beskriva förhållandena miljoner år bakåt i tiden, medan t ex händelser som inträffat efter senaste nedisningen tydligt kan spåras i vattensammansättningen /Laaksoharju och Wallin, 1997; Rhén et al, 1997/.

### **Bakteriella processer**

På förvarsdjup förekommer många slags mikrober av vilka bara de typer är aktiva som gynnas av den rådande kemiska miljön /Kotelnikova och Pedersen, 1998/.

Bakteriella processer har stor betydelse för grundvattnets sammansättning. Detta gäller särskilt pH och Eh. Bakterier bidrar bland annat till att förbruka löst syre i infiltrerande ytvatten, reducera trevärt järn i sprickmineral och reducera sulfat i sulfatrikt gammalt havsvatten /Laaksoharju (ed), 1995; Banwart (ed), 1995; Pedersen och Karlsson, 1995/.

## Osäkerheter

Det finns osäkerheter om de olika processernas betydelse för den kemiska utvecklingen i förvaret både på kort och på lång sikt. I många fall är det inte osäkerheterna i förståelsen av själva processerna som har störst betydelse, utan osäkerheterna i omständigheterna under vilka de olika processerna är verksamma. Vattenkemin kommer t ex att utvecklas helt annorlunda under en istid jämfört med vad som blir fallet utan en inlandsis, även om samma kemiska processer är verksamma.

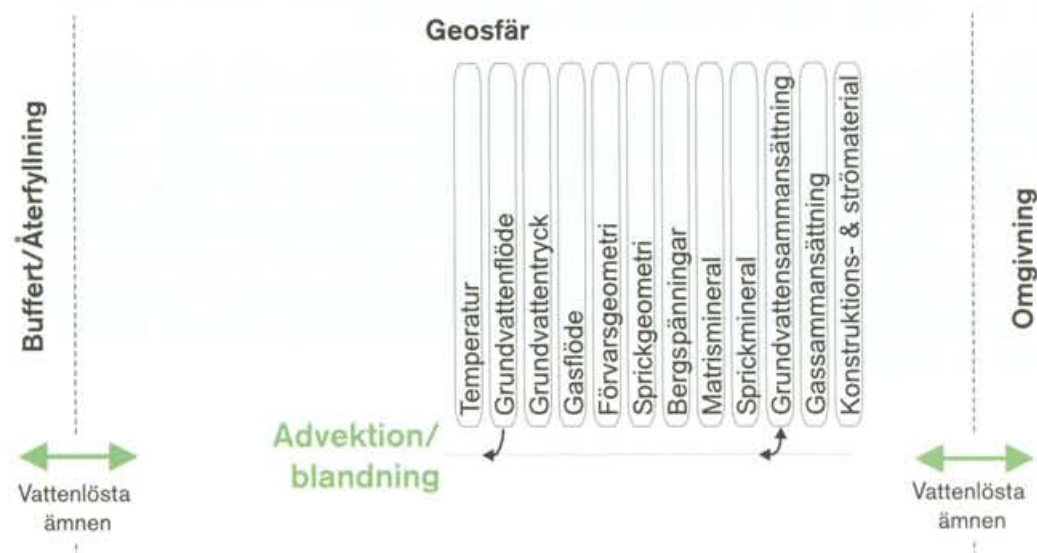
Generellt ökar osäkerheten med tiden. Det är möjligt att ge en god beskrivning av de förväntade förhållandena ett tusen till tiotusen år framåt i tiden. Förhållandena över tidsperioden 10 000 till 100 000 år måste anses spekulativa utgående från förväntade eller möjliga klimatförhållanden.

## Hur kan processerna hanteras i säkerhetsanalysen?

De olika processerna kan behandlas kvalitativt (diskussionsmässigt) eller kvantitativt (i beräkningar) beroende på vilken kunskap man har och på vilken betydelse processen har för utvecklingen. Det är eftersträvänsvärt att genomföra beräkningar med de processer som har den största betydelsen för förvarets utveckling oavsett om detta är kritiskt för själva säkerhetsanalysen eller inte. På grund av den stora naturliga variabiliteten i flödes hastighet och uppehållstid samt de komplexa blandningsförhållandena kan vattenkemins utveckling endast beräknas längs typiska flödesvägar. Emellertid bör detta vara tillräckligt för att visa att det finns en god förståelse för de mekanismer som påverkar vattnets sammansättning under de förhållanden som förväntas råda på förvarsdjup.

Med dagens kunskapsnivå kan grundvattnets kemiska sammansättning kvantifieras för en tidsperiod fram till nästa förväntade istid. Tiden från öppethållande till strax efter förslutning kan kvantifieras om platsspecifika förhållanden och mängder och typer av konstruktionsmaterial är kända. Av största vikt är att beskriva kemisk stabilitet med hänsyn till pH- och Eh-förhållanden samt halter av de viktigaste jonslag som påverkar ingenjörsbarriärerna, se avsnitten bentonit och kapsel.

## 5.7.2 Advektion/blandning



Figur 5-21. Advektion/blandning.

## **Överblick**

Advektion, transport med det strömmande vattnet, är den viktigaste transportprocessen för lösta ämnen i grundvattnet. Processen har central betydelse för förvarets kemiska utveckling dels eftersom den svarar för transport av ämnen som påverkar bentonit och kapsel till förvaret, dels eftersom eventuella utsläpp av radionuklider från förvaret kan transporteras till biosfären med advektion. Dessutom svarar advektionen för till/borttransport av ämnen till nästan alla kemiska reaktioner inom geosfären.

Utbytet av lösta ämnen med biosfär, avlägsna delar av geosfären samt med buffert/återfyllning i förvaret utgör randvillkor för processen. Vid klimatförändringar ändras sammansättningen hos inträngande vatten och detta leder till storskaliga och långsiktiga förändringar av vattensammansättningen. Advektionen leder därigenom till att olika vattentyper ersätter varandra och/eller blandas.

En detaljerad beskrivning av den matematiska modelleringen av advektion ges i avsnittet om radionuklidtransport.

Nedan beskrivs i huvudsak studier av den historiska utvecklingen av advektion/blandning som genomförts för att få en bättre förståelse för utvecklingen i framtiden.

## **Allmän beskrivning**

De faktorer som påverkar grundvattenströmning har beskrivits i avsnitt 5.5 om hydrauliska processer i geosfären. Grundvattnet rör sig i bergets spricksystem, med huvuddelen av flödet koncentrerat till flödesvägar med god genomsläpplighet. Dessa möts i större eller mindre omfattning så att vatten från olika vattenförande sprickor blandas. Under statistiska förhållanden med konstanta drivkrafter kommer skillnaden i sammansättningen hos de vatten som blandas att vara liten. Däremot kommer stora skillnader att förekomma då grundvattenströmningen ändrar riktning och då vatten av en annan typ kommer ner i flödesvägarna.

In- och utströmning av grundvatten, det geografiska läget för högsta och lägsta grundvattenytan samt storleken av tryckhöjdsskillnaden är de faktorer som bestämmer flödesförhållandena. Ett exempel på kontraster i detta hänseende är den kraftiga potential som ett tjockt istäcke vid en glaciärrand kan skapa i jämförelse med den fullständiga utjämning som råder i berget under en mycket stor sjö eller ett hav.

**Utveckling sedan senaste istid:** Efter senaste istid har Östersjöns olika utvecklingsstadier påverkat grundvattnets blandning i varierande grad beroende på läget i förhållande till kustlinjen. I samband med inlandsisens avsmältning trängde glacialt vatten ned i berggrunden, trängde undan det tidigare vattnet och blandade sig med detta i gränsskiktet. Det är idag omöjligt att sätta en gräns för hur djupt glacialvattnet nådde, men till en nivå av 100–300 meters djup finner man allmänt stora andelar av vatten som härrör från kalla klimatförhållanden. Spår av sådant vatten förekommer även på större djup. Det är emellertid oklart om detta vatten har samma ursprung, eller om det kan härröra från en tidigare isavsmältning.



På platser som någon gång varit havstäckta sedan istiden ser man i allmänhet inslag av gammalt havsvatten. Drivkraften för infiltrationen av havsvatten är den högre densiteten som gjort att vattnet trängt ner i berget till det djup där salthalten varit lika hög. Landhöjningen har sedan gjort att tidigare havstäckta platser kommit ovanför havsytan och därmed blivit utsatta för in- och utströmning som styrs av nederbörd och topografi.

**Förhållanden på stora djup:** På stort djup påträffas vanligtvis mycket salt vatten. Djupet till det salta vattnet varierar från plats till plats. Salthalten överstiger havsvattnets och visar att dess ursprung är en sk brine, ett mycket salt vatten där saltet lakats ur berget under miljontals år.

Blandning är således en process som i allt väsentligt styrs av yttre (klimat)förhållanden och som har en avgörande betydelse för vilka förändringar man kan förvänta sig i grundvattnets sammansättning framöver. Den uppenbara förändringen i sammansättningen, framförallt i kustnära områden men kanske även i övriga delar av landet, är övergångar mellan glacialt smältvatten, marint saltvatten, sötvatten från nederbörd samt bräckt vatten under permafrost. Varje vattentyp kan tränga undan det tidigare grundvattnet, ändra jämvikter, nybilda eller upplösa sprickmineral m m.

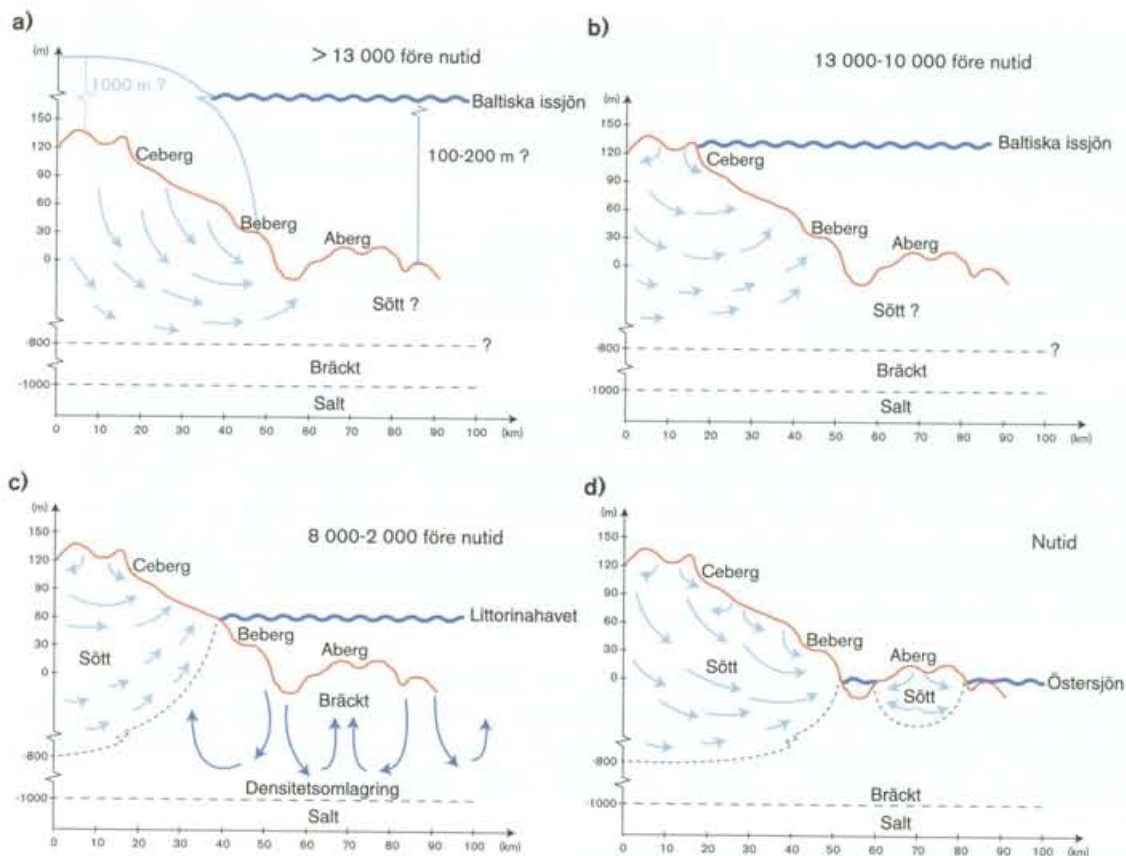
Det har förekommit ett tiotal istider under den senaste miljonen åren och därmed troligen ett fyrtiotal genomgripande förändringar av detta slag. Var och en av dessa har lämnat spår efter sig speciellt i de lågkonduktiva delarna av berget där utbytet är långsammare än i de konduktiva stråken, se vidare under osäkerheter.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Blandningens betydelse för de observerade kemiska förhållandena har länge varit en kvalitativ kunskap. Man har via statistisk multivariatanalys kunnat konstatera att ett vattenprov t ex innehållit både en modern och en mycket gammal komponent samtidigt.

Modellutvecklingen under utvärderingen av de hydrokemiska förhållandena på Äspö har gjort det möjligt att beräkna andelen av olika identifierade vattentyper med hjälp av de ingående komponenterna natrium, kalium, kalcium, magnesium, klorid, sulfat, karbonat, deuterium, tritium och syre-18 /Laaksoharju och Wallin, 1997; Rhén et al, 1997/. Resultaten antyder att blandning har förekommit i flera skeden, som resultat av varierande flödesförhållanden. Efter senaste istid har följande blandningsprocesser identifierats och kvantifierats:

- 1) Glacialt smältvatten har trängt ner till flera hundra meters djup och där blandat sig med salt grundvatten som åtminstone delvis varit isolerat från atmosfären i miljontals år.
- 2) Därefter har bräckt Östersjövatten från Littorinastadiet (7000 år sedan) genom sin högre densitet sjunkit ner genom sötvattnet tills det nått ett salt vatten med samma densitet. Vid denna inversion har det glaciala smältvattnet trängts upp i de konduktiva stråken, men även blivit kvar i det lågkonduktiva berget.
- 3) Meteoriskt vatten har sedan successivt trängt ner till 100–200 m djup sedan regnvatten började infiltreras då Äspö steg ovan havsytan för cirka 3000 år sedan.



**Figur 5-22.** A- Be- och Cebergs utveckling från isavsmältningen efter senaste istid fram till idag. Östersjöns olika stadier har stor betydelse för den storskaliga grundvattenomsättningen på de tre platserna. Skillnaden mellan platserna är störst under perioden från Litorinastadiet fram till dagens situation.

En hydrodynamisk simulering av dessa förhållanden har utförts av /Svensson, 1999/. Alla de olika vattentyperna som förekommit sedan senaste isavsmältning har introducerats under de tryck och övriga randvillkor som anses relevanta. Den transienta simuleringen visar hur olika vattentyper successivt ersätter varandra. På 450 m djup under Äspö dominerar i tur och ordning glacialt smältvatten (utgångsläge), Yoldiahavets vatten, Ansylussjöns vatten, Litorinahavets vatten och till slut dagens meteoriska vatten. Denna simulering inkluderar varken blandning eller inträngning i stagnanta lågkonduktiva partier av berget. Därför finns inte heller några spår efter de tidigare vattentyperna, som *de facto* kan spåras i vattenkemin. Andra analyser som inkluderar dispersion visar att man kan förvänta sig en kvardröjning, som stämmer väl med den hydrokemiska bilden / Voss och Andersson, 1993; Löfman och Taivassalo, 1995/.

Jämförelsen antyder att det är nödvändigt att inkludera samtliga de processer som påverkar vattenomsättningen för att man ska få en riktig beskrivning. Växelverkan med lågkonduktiva partier och isolerade vattenmagasin har betydelse för vattnets omsättningshastighet.

### **Tidsperspektiv**

Tidsperspektiven bestäms av tidsperspektiven för klimatförändringar samt av hur länge sådana förändringar fortsätter att påverka den grundvattenkemiska situationen.

Förhållandena under t ex en istid blir beroende av isens beskaffenhet, varaktighet etc. En effekt av den senaste istiden är t ex den pågående landhöjningen som kan innebära att salt vatten ersätts med sött ytvatten. Denna utbytesprocess kan pågå i tidsperspektivet tusentals år efter en glaciation på förvarsdjupet 500 m.

I ett kort tidsperspektiv, cirka 100 år, kommer störningen i grundvattnet som förvaret åstadkommer att i någon mån påverka grundvattenkemin.

Tidsperspektivet för advektion då det gäller radionuklidtransport från förvaret till ytan behandlas i avsnittet om radionuklidtransport.

### **Naturliga analogier**

En datormodell för utvärdering av hydrokemiska data, kallat M3, har utvecklats med hjälp av de data som insamlats i och kring Äspölaboratoriet. Modellen har också använts för att beskriva de hydrokemiska blandningsförhållandena inom analogistudierna i Oklo och Palmottu /Laaksoharju et al, 1999; Gurban et al, 1998/. I båda fallen har, liksom på Äspö, effekter av blandning kunnat särskiljas från effekter av kemiska reaktioner. Vid modellstudien i Oklo kunde de beskrivna flödesförhållandena verifieras med hydrogeologiska modeller i efterhand.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

**Osäkerheter i grundläggande förståelse:** De konceptuella osäkerheterna kring advektion/dispersion är små. Advektion/dispersion är två väl definierade modelltermer som används vid beräkning av radionuklidtransport i grundvatten. Dessa behandlas i avsnitt 5.8.1.

De modeller som används för hydrokemisk modellering är begränsade till den plats från vilken data härrör. Därmed blir även den prediktiva kapaciteten hos de modeller som används begränsad till ett och samma geografiska område eller liknande områden där motsvarande processer är verksamma. Blandningsmodellen för Aberg kan t ex appliceras i Beberg och Ceberg endast om man kan anta att dessa platser genomgått en liknande utveckling som Aberg.

Det finns emellertid likheter i datamängderna som gör att tillförlitligheten ändå kan anses god. Mycket generaliserat kan man påstå att grundvattenkemin uppvisar en medeluppehållstid av något tiotal till hundratal år i de översta 100 m av berget medan uppehållstiden på 500 m djup ligger i intervallet tusen till tiotusentals år. På större djup, mer än 1000 m, är uppehållstiderna mycket längre.

Blandning är i strikt mening ingen process utan ett samlat resultat av advektion och diffusion. Blandning utvärderas genom s k invers modellering vilket innebär att man utifrån känt resultat (data) försöker kvantifiera de bakomliggande processerna, i detta fall blandningen. Sekvensen i vilken olika blandningar förekommit utgör en grundläggande osäkerhet i tolkningen av blandningsprocessen. Till detta kommer graden av blandning (störning) som förorsakats av hålbörning och provtagning som ytterligare komplicerar situationen (dataosäkerhet).

De blandningsfenomen som förekommit nyligen kan kvantifieras bättre och med större säkerhet än de som skett långt tillbaka i tiden. Det är t ex relativt enkelt att spåra meteoriskt vatten som infiltrerat på Äspö sedan ön steg upp ovanför havsytan för ca 3000 år sedan. Däremot är det omöjligt att avgöra om smältvatten från den senaste istiden nått ner endast till några hundra meters djup, eller mycket djupare.

**Osäkerheter i data:** Vid borrning och efterföljande provtagning blandas vatten från olika delar av spricknätverket. Denna blandning kan felaktigt tolkas som representativ för den punkt i berget där provet tagits. Under ogynnsamma förhållanden kan vattnet härröra från en helt annan plats eller vara uppblandat med olika vattentyper från många olika platser. Genom att märka spolvatten som används vid borrning, går det att i efterhand korrigera för den mängd vatten som tillförts. Det är svårare att korrigera eventuella störningar som förorsakats av att vatten från ett spricksystem strömmar in i borrhålet och ut i ett annat spricksystem. Noggranna utvärderingar har genomförts i syfte att bland annat utröna hur representativa vattenproven är /Smellie et al, 1985, 1987; Smellie och Laaksoharju, 1992; Laaksoharju och Skårman, 1995; Laaksoharju et al, 1995b/. Man kan se en positiv trend i dessa utvärderingar.

Typområdesundersökningarna som genomfördes inför KBS-3 rapporteringen i början av 80-talet gav ca 15 procent representativa provtagningspunkter, Klipperås gav 40 procent och Äspö 60 procent representativa vattenprov.

Utöver osäkerheten i representativitet finns en mindre osäkerhet i bestämningar och analyser. Dessa varierar beroende på analysmetod och konstituent. De största osäkerheterna gäller för redox- och pH-känsliga komponenter, t ex sulfid, järn, mangan och vätekarbonat där osäkerheten kan vara 50 procent. För övriga analyser ligger osäkerheten under 10 procent.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Processen ingår som en integrerad del av den grundvattenkemiska utvecklingen.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenario.

**Klimatförändringar:** Den grundvattenkemiska situationen och utvecklingen i geosfären modelleras med hänsyn till förväntad klimatutveckling. Den baseras i stort på den kunskap som erhållits genom rekonstruktion av tidigare kemiska och hydrologiska förhållanden. Beskrivningarna delas lämpligen upp i tidsintervallen 0–100 år, 100–1 000 år, 1 000–10 000 år och 10 000–100 000 år efter förslutning.

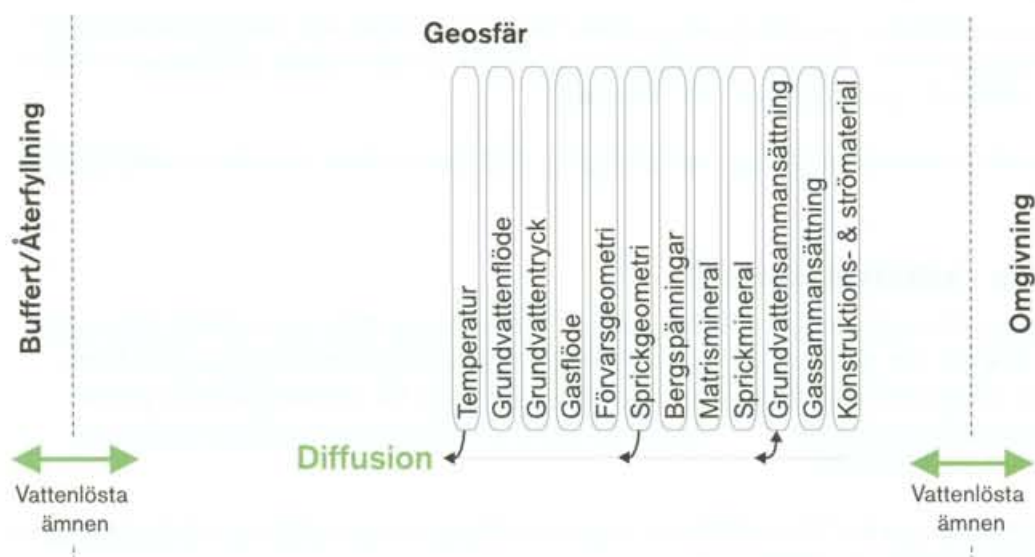
I tidsintervallet 10 000–100 000 år kommer antaganden kring istidsscenarioet att bestämma även de hydrokemiska förhållandena. Kraftiga variationer i de hydrauliska drivkrafterna kommer att få till följd att grundvatten av olika typer kommer att blandas och därigenom leda till upplösnings- och utfällningsreaktioner av bland annat kalcit.

Kvalitativa beskrivningar bör göras med extrema vattenkemiska förhållanden. Vid en istid kan ett jonfattigt vatten, som gör att bentoniten bildar kolloider, föras ner. Den motsatta extremen är att ett mycket salt vatten förs upp till förvarsnivå och därmed minskar buffertens svällförmåga. Diskussionen ska föras om förutsättningarna för att detta ska ske. I SR 97 diskuteras denna typ av frågor i Boulton et al /1999/.

Av speciell betydelse i istidsscenarioet är en eventuell nedtransport av syresatt vatten till förvaringsnivå. Förhållandena då skiljer sig från dagens genom att det möjligen inte finns något jordtäckte som kan bidra med organiskt nedbrytbart material som bakterier kan använda för att förbruka löst syre. Inom SR 97 har beräkningar genomförts /Guimera et al, 1999/ som visar att grundvattenflödet har en avgörande betydelse för hur lång tid det tar innan syresatt vatten når ner till förvaringsdjup. Beräkningarna visar även att mängden syre som kan transporteras på detta sätt är begränsad och att berget har kapacitet att förbruka detta syre.

**Jordskalv:** Flödesvägar kan påverkas och därmed advektionen. Påverkan på vattenkemin kan anses försumbar i jämförelse med övriga osäkerheter i detta scenario.

### 5.7.3 Diffusion



Figur 5-23. Diffusion.

#### Överblick, allmän beskrivning

Lösta ämnen i grundvattnet kan genom diffusion röra sig från områden med högre till områden med lägre koncentration i berggrundens spricksystem. Diffusionshastigheten bestäms av vattnets och de lösta ämnenas egenskaper samt av temperaturen.

Diffusionen som transportmekanism får betydelse där transporten med det flödande vattnet, advektionen, är liten, dvs vid stagnanta förhållanden. Sådana kan råda på stora djup eller i täta bergpartier. Diffusion är betydelsefull också genom att ämnen kan diffundera mellan det flödande vattnet i sprickor och stagnant vatten i bergmatrisens porer, s k matrisdiffusion. Denna aspekt av diffusion är framför allt viktig för beräkning av radionuklidtransport, se avsnitt 5.8.

### **Modellstudier/experimentella studier**

I en stagnant situation som varat länge kunde man vänta sig att diffusionen påverkat förhållandena påtagligt. Beräkningar har utförts på basis av salthaltsprofilen i borrhålet KLX02 på Laxemar, väster om Äspö. Resultaten överensstämmer relativt väl med uppmätta värden om man antar en diffusionstid av en miljon år /Laaksoharju och Wallin, 1997/. Som framgår i avsnittet om osäkerheter är det oklart hur mycket av profilen som härrör från diffusion och hur mycket som kan bero på störningar i borrhålet /Rhén et al, 1997/.

### **Tidsperspektiv**

Matrisdiffusion kan vara betydelsefull vid nuklidtransport, se avsnitt 5.8.3.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

I grunden är diffusion en enkel process som väl kan beskrivas och modelleras även för vattenförande partier i berget. Svårigheten i praktiken är att urskilja effekterna av diffusion ur effekterna av reaktioner och blandning.

Konceptuella osäkerheter kring matrisdiffusion diskuteras under avsnittet radionuklidtransport.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** För att förklara den långsamma förändringen från t ex salt till sött vatten på stort djup är det nödvändigt att kvalitativt beskriva diffusionsförloppet. Det finns dock inga belägg för att diffusion varit eller kommer att bli betydelsefull för grundvattensammansättningen på förvarsdjup. Effekter av diffusion i geosfären analyseras därför inte i basscenariot.

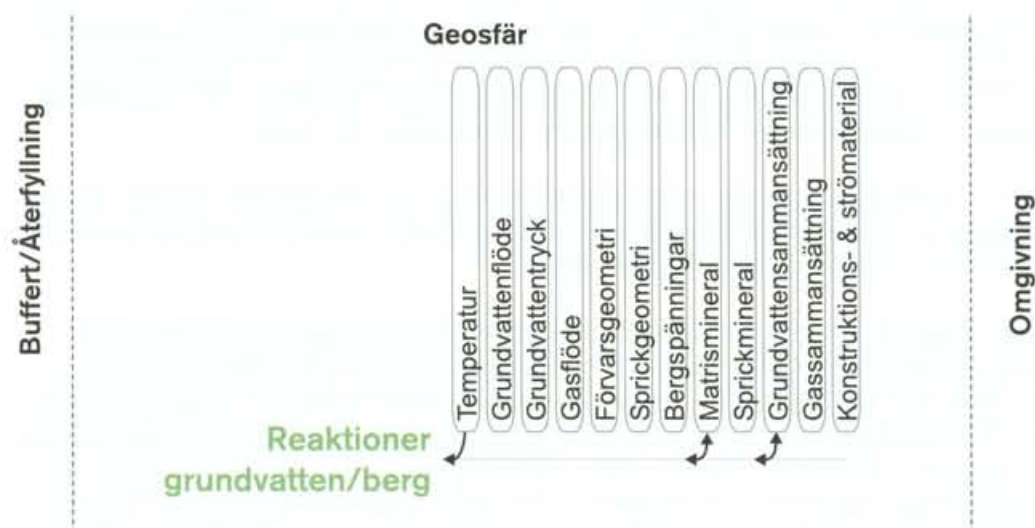
**Kapseldefektscenario:** Matrisdiffusion utgör en viktig retentionsfaktor vid beräkning av radionuklidtransport, se avsnitt 5.8.

**Klimatförändringar:** Vid analys av återkommande glaciationer finns det anledning att bedöma betydelsen av diffusion. I SR 97 analyseras t ex nedträngning av syre (oxiderat vatten) efter en glaciation och hur detta påverkar underliggande salt grundvatten. För att detta syre ska förbrukas av mineral i berget måste vattnet diffundera in i matrisen. Se vidare avsnitt 5.7.5 för en diskussion kring denna process.

**Jordskalv:** Se basscenario.



## 5.7.4 Reaktionen grundvatten/bergmatrix



Figur 5-24. Lösning/fällning bergmatrix.

### Överblick

Stillastående grundvatten kommer med tiden genom reaktioner med berggrundens olika mineral att närma sig en kemisk jämvikt. De flesta reaktioner mellan vatten och mineral är dock så långsamma att en fullständig jämvikt aldrig hinner uppnås även om vattnets omsättning i berggrunden är mycket långsam.

Grundvattnets många reaktioner med bergmatrisen har betydelse för grundvattnets kemiska utveckling i allmänhet. Det är dock endast en del av dessa som har betydelse för den kemiska utvecklingen i förvaret i ett miljonårsperspektiv.

### Allmän beskrivning

Ända sedan bergarterna bildades för nästan två miljarder år sedan har kemiska reaktioner omvandlat och påverkat berget och dess spricksystem. Vid bergartsbildningen frigjordes vatten som innehåller även andra restprodukter som inte passat in i kristallgittret t ex klorid, natrium och kalcium. Detta vatten kallas juvenilt och har alltid funnits nere i berget och innehåller oftast stora mängder lösta salter. Om salthalten i vattnet överstiger 10 procent, dvs 100 g/l TDS talar man om brine (på svenska saltlake) /Frape och Fritz, 1987/. Ett sådant vatten är stillastående på grund av dess höga densitet som dessutom ökar med tiden, då mera salt lakas ur bergmatrisen.

De kemiska reaktioner som sker i grundvatten/mineralsystemet har starkt varierande reaktionshastigheter. Därmed kan man även i viss mån utnyttja kända reaktionshastigheter till att bedöma uppehållstiden för grundvattnet i berget. Graden av jämvikt ger en grov uppfattning om omsättningstid. Bruno har sammanställt reaktionshastigheter för olika slags reaktioner /Grenthe et al, 1997/. Snabbast är metallhydrolys med halveringstider på mikrosekunder till tiondels sekunder. Därefter följer komplexbildning mellan metaller och organiska ligander med halveringstider på hundradels sekunder till minuter, fulvo och humusbindning går ca tio gånger långsammare. Redoxreaktioner med en elektronöverföring tar från tiotals minuter till några år medan redoxreaktioner som kräver molekylstrukturförändringar har halveringstider på några få till tusentals år.



Reaktioner där fasta faser (mineraler) ingår är generellt mycket långsammare än de reaktioner som endast sker i vattenfasen. (Undantag är jonbytesreaktioner som sker lika snabbt som reaktioner i vattenfasen.) Att lösa hematit i vatten tar tiotals till tiotusentals år och upplösning av aluminiumsilikat tar tiotusentals till miljoner år. Det finns dock reaktioner mellan fast fas och vatten som är avsevärt mycket snabbare, t ex upplösning och utfällning av kalcit som har halveringstider på sekunder till dagar.

Emellertid är reaktionshastigheten också starkt beroende av den kemiska miljön där den sker. Utfällning av järn(oxy)hydroxid sker från pikosekunder upp till tiotals år beroende på pH förhållande och järnhalter i grundvattnet.

Vid mycket högt pH, som kan uppkomma i kontakt med betong, är reaktionshastigheterna för upplösning av silikatmineral i granitisk berggrund betydelsefulla. Silikatmineralen löses upp till följd av hydrolysreaktioner, varefter sekundära reaktionsprodukter faller ut. Värdefull kunskap om reaktionsförloppet har erhållits från de hyperalkaliska källorna i Maqarin i Jordanien /Smellie (ed), 1998/. Man vet inte speciellt mycket om reaktionshastigheten men antar att reaktionen kan sänka pH-värdet till 10–11 och att det förmodligen är ett ytterligt tunt skikt av mineralen som reagerar. Vid högt pH består dessa sekundära faser av kalciumsilikathydrater (CSH) som är vanligt förekommande i betong. Vid lägre pH värden bildas zeoliter.

Mycket salt grundvatten, brines, förekommer och påträffas överallt där man borrar ner till stora djup. Djupet varierar kraftigt från några hundratals meter till flera km. Det visar därmed hur djupt de ytliga cirkulationscellerna nått någon gång efter att brinen bildats vilket ofta är miljontals år tillbaka i tiden. Därför innebär frånvaro av brine inte med nödvändighet att sena cirkulationer av ytvatten har förekommit, däremot att det någon gång efter att bergarterna bildats har förekommit vattenomsättning på detta djup.

Brines kan också bildas genom att evaporiter (salt som härrör från ett intorkat hav långt tillbaka i tiden) löses upp av infiltrerande grundvatten. Generellt kan man anse att brines med evaporitiskt ursprung är vanligt förekommande i sedimentära bergarter, medan urlakning är en troligare källa för brines i kristallin berggrund. I båda fallen är dock förekomsten en entydig indikation på att vattnet är stagnant.

Effekten av de olika nämnda reaktionerna mellan vatten och mineral syns även i berget. Sedan berget bildades har omvandling av primära mineral till sekundära (ler)mineral ständigt pågått. Effekterna har varit som störst under så kallade hydrotermala förhållanden då hett aggressivt vatten passerat genom bergets flödesvägar, företrädesvis de större sprickzonerna. I den skandinaviska urbergsskölden upphörde de hydrotermala förhållandena för flera hundra miljoner år sedan, och det vatten som då passerade genom berget har försvunnit. Effekterna i berget är att material lösts ut och hålrum bildats, så kallade druser, samtidigt som på andra ställen stora mängder spickfyllnadsmineral har avsatts. Efteråt har dessa spricksystem utsatts för reaktiveringar vid flera olika tillfällen. Detta gör att vattnets tidigare flödesvägar i berget blir svåra att härleda, också i de större vattenförande sprickzonerna.

Även i icke salt grundvatten är en ökande grad av kemisk jämvikt en indikation på att vattnet är stagnant. Hur sådana vatten kommer att utvecklas i framtiden är en svårare fråga. Även i detta fall kan man utgå ifrån ett antagande om att förhållandena är konstanta och därifrån analysera hur förändringar i de hydrologiska förhållandena påverkar situationen, se vidare under blandning.

Bergets mineral har varierande benägenhet att omvandlas eller upplösas i grundvatten. I mikroskala i bergmatrisen äger sannolikt samma reaktioner rum som de som sker i makroskala i vattenförande sprickzoner. Skillnaden är främst att vattnet i matrisen är stagnant och transport av reaktanter och reaktionsprodukter endast sker via diffusion. Det finns ingen skarp gräns mellan enskilda vattenförande sprickor och bergmatrisen. Hittills har endast blygsamma försök gjorts för att karaktärisera kemin hos bergets porvatten. Studier i URL i Kanada visar att i bergmatrisen finns mycket salt vatten även om vattnet i de vattenförande partierna saknar påtagliga salthalter.

**Påverkan på pH:** Bergets mineral har betydelse för grundvattnets pH-värde. Det finns en direkt inverkan som beror av växelverkan mellan vattnet och lätt lösliga mineral såsom kalcit, och en indirekt påverkan som styrs av långsam vittring, vattnets kemi och mikrobiella förutsättningar. Det finns en klar tendens till att pH-värdet ökar mot djupet, dvs med omsättningstiden, för icke salt vatten, med extremvärden upp till 10 pH-enheter. För salt grundvatten ligger pH-värdena inom ett snävare intervall och går sällan över 8,5. Däremot förekommer på stort djup (mer än 1000 m) pH-värden under 7 och ner till som lägst 5,2 i extremt salta kanadensiska brines /Frape och Fritz, 1987/. Det finns ett hypotetiskt samband mellan hydrolysreaktioner och deras betydelse för pH-nivån. Detta har verifierats för flera granitiska bergarter /Tolhuat et al, 1992/.

**Påverkan på redoxförhållanden:** Berggrundsmineralens innehåll av reducerande ämnen som sulfid, tvåvärt järn och mangan är väsentliga för att upprätthålla reducerande förhållanden i grundvattnet. Kapaciteten för att motstå en attack av oxiderande ämnen, t ex syre som innesluts i förvaret vid stängning, eller syrerikt vatten som tränger ner vid avsmältningen av en glaciär, finns i mineralen. Redoxnivån, Eh-värdet, och kinetiken i reaktionerna bestäms av de dominerande redoxparen i lösning tillsammans med arten och mängden av mikrober.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Med hjälp av termodynamiska beräkningsverktyg kan man räkna ut vilka mineralomvandlingar man förväntar sig under olika förhållanden. Noggrannheten i data och reaktioner är tillräcklig, däremot är kunskapen om reaktionskinetiken sämre vilket gör det svårt att få ett grepp om vilka tidsperioder man behöver ansätta för att uppnå jämvikt.

### **Tidsperspektiv**

Mycket salt vatten, brine, kommer att förbli oförändrat under den geologiskt sett korta tid som behövs för säker deponering av kärnavfall. Att brines fortfarande existerar beror på att de är stabila i tiden. Detta gäller även för de primära mineralen i berget. De förhållanden som råder idag kommer att vara relevanta under hela förvarets livslängd.

Kemiska reaktioner som påverkar vattnets sammansättning förekommer i ett tidsperspektiv av tusentals till hundratusentals år. För att producera ett vatten med extremt hög salthalt, s k Brine krävs betydligt längre tider. Rådande kemiska grundvattensammansättning är resultat av många olika pågående reaktioner. Genom att dessa pågått under en lång tid har de uppnått en statisk situation där effekterna av olika reaktioner balanserar varandra. Därmed kan man anse sammansättningen vara statisk, dvs förbli som den är om inte förändringar i flödesförhållandena förorsakar förändringar i blandningsproportionerna mellan olika vattentyper.

### Sammanfattning av osäkerheter

Flera olika mineralomvandlingsreaktioner ligger bakom utvecklingen av vattenkemin och i extrema fall bildning av brines. Slutresultatet av dessa reaktioner är i allmänhet väl känt. Osäkerheten ligger i kinetiken för reaktionerna, där man vet att många är extremt långsamma. Därför är det också vanskligt att betrakta vatten/mineral systemet som om det vore i jämvikt och därigenom kan beskrivas med hjälp av termodynamiska data. Trögheten i systemet, dvs den långsamma kinetiken, gör dock att man kan förvänta sig små förändringar förorsakade av upplösning och utfällning i bergmatrisen i det geologiskt sett korta tidsperspektiv som behövs för deponering av använt kärnbränsle.

### Hantering i säkerhetsanalysen

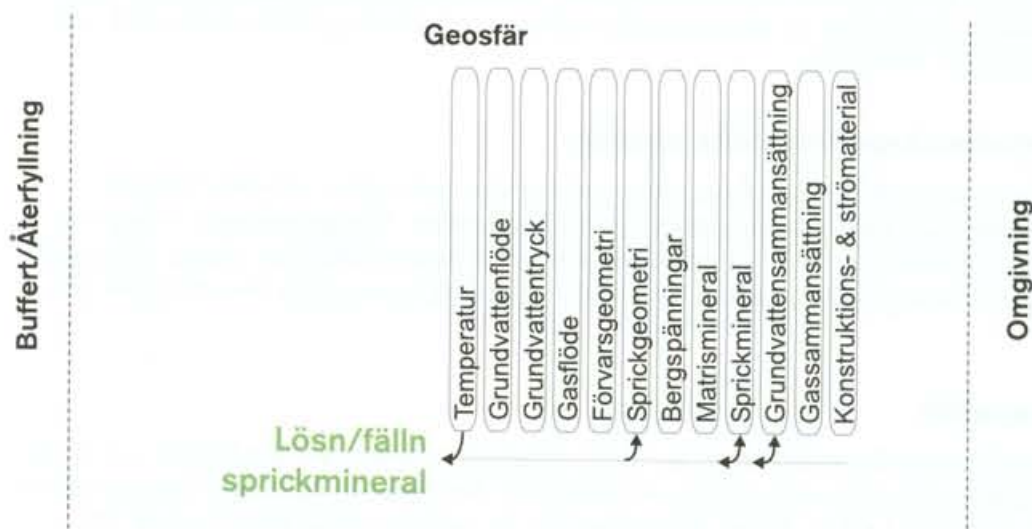
**Basscenario:** Processen bedöms inte orsaka nämnvärda förändringar i grundvattensammansättningen eller matrisporositet i basscenariot. Förändringar i pH orsakade av cement behandlas i avsnitt 5.7.7.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenariot.

**Klimatförändringar:** Se basscenariot.

**Jordskalv:** Se basscenariot.

### 5.7.5 Lösning/fällning sprickmineraler



Figur 5-25. Lösning/fällning sprickmineraler.

### Överblick

Mineral på sprickytor kan lösas i grundvattnet. Omvänt kan lösta ämnen i grundvattnet fällas ut på sprickytorna.

Under stationära förhållanden är dessa processer i allmänhet mycket långsamma. Vid transienta förlopp, t ex vid infiltration (inflöde) av surt eller syresatt vatten i berggrunden är sprickmineralernas förmåga att buffra (motverka) kemiska förändringar betydelsefull. Vid radionuklidtransport är växelverkan mellan lösta nuklider och sprickytor betydelsefull.

### **Allmän beskrivning, modellstudier/experimentella studier**

Reaktioner mellan vatten och sprickmineral ger bland annat upphov till omvandling av primära mineralfaser till sekundära. Fenomenet kallas kemisk vittring och de sekundära mineralfaserna utgörs bland annat av olika slags lermineral. I krossade partier, där både mekanisk och kemisk påverkan förekommit vid olika tillfällen sedan berget bildades, finns en stor mängd olika sekundära sprickfyllnadsmineral. Vid en noggrann kartering kan man se i vilken sekvens dessa bildats /Tullborg et.al, 1991/. Det är dock vanligtvis svårt att avgöra när och under vilka förhållanden det skett. Genomgående gäller att de allra flesta sprickfyllnadsmineral har uppkommit under hydrotermala förhållanden (temperaturer över 100 °C och tryck mycket över 1 bar) långt tillbaka i tiden. Därefter har de utsatts för omvandlingar vid flera olika tillfällen.

På enskilda sprickytor finns även utfällda mineral som bildats genom att vatten av olika sammansättning blandats. Sådana utfällningar är kalcit, gips, siderit, pyrit, fluorit och vissa järnoxider. Dessa mineralfasers existens gör att man kan dra kvalitativa slutsatser om vilken vattenkemi som rått då mineralen bildades. Däremot kan den motsatta reaktionen, upplösning av sprickmineral, varken identifieras eller kvantifieras. En snabb transport av ett koldioxidrikt vatten kan t ex relativt snabbt lösa upp kalcit i en flödesväg och vid blandning med ett annat vatten fälla ut kalcit på sprickytor. Kalcitmineral i en och samma spricka har undersökts på olika djup för ge upplysning om upplösningshastigheten och därmed grundvattenomsättningen /Landström och Tullborg, 1995/.

**Medfällning radionuklider:** För nuklidtransport och förståelse av retentionsprocesser för radionuklider är fällnings- och lösningsreaktioner av stor betydelse. Små mängder nuklider kan vid fällning av olika mineralfaser följa med i t ex kalcitgittret. Processen kallas medfällning och kan beskrivas kvantitativt. Andra spårämnen som förekommer i grundvattensystemet har kunnat modelleras via medfällning och det är troligt att även radionuklidhalter i grundvatten skulle kontrolleras av denna process /Bruno et al, 1996/.

**Påverkan på natrium- och kalciumhalt:** Infiltrerat nederbördsvatten som innehåller kalcium får en ökande halt av natrium mot djupet, medan infiltrerat havsvatten förlorar natrium i utbyte mot kalcium. Orsaken är jonbyte som sker i lermineral tillsammans med vittrings- och utfällningsreaktioner. Dessa reaktioner gör att vattnet oberoende av om det är sött eller salt kommer att hålla en viss koncentration och proportion av natrium och kalcium. Mycket utspädda grundvatten är ovanligt på större djup och kalciumhalten överstiger i allmänhet 10 mg/l på förvarsdjup. Detta är viktigt eftersom kalcium destabiliserar kolloidala partiklar vid en halt som överstiger cirka 4 mg/l.

**Påverkan på magnesium- och kaliumhalt:** Katjonerna magnesium och kalium är vanligt förekommande i grundvatten, men deras koncentration hålls nere genom upptag i smektitleror och utfällningsreaktioner. Detta är påtagligt på platser där havsvatten infiltrerat berget och halterna sjunkit från en hög nivå till under 150 mg/l för magnesium och under 12 mg/l för kalium.

**Påverkan på pH:** Grundvattnets pH ligger vanligtvis i intervallet 6,5–9,5. Av störst betydelse för pH-värdet i det infiltrerande grundvattnet är reaktioner mellan koldioxid löst i vattnet och kalcitmineral i bergets spricksystem. Karbonatsystemet intar snabbt ett jämviktstillstånd och bestämmer vattnets pH-värde som då kommer att ligga runt 8.5 /Stumm och Morgan, 1981/. Den totala karbonathalten varierar ofta inom intervallet 100 till 300 mg/l och överstiger sällan 600 mg/l. Extremt höga karbonathalter kan förekomma som resultat av biologisk aktivitet. Halter på 1000 mg/l har vid enstaka tillfällen registrerats. De biologiska processerna som driver upp karbonathalten gör också att pH-värdet sjunker till under 7.

Mot större djup minskar vanligtvis karbonathalten och salthalten ökar. Salta grundvatten som legat isolerade under lång tid har i allmänhet ett lägre pH än icke salta stagnanta vatten. Anledningen kan vara att vätejoner som sitter i mineralskikten kan ersättas av katjoner i vattnet så att fler protoner kommer ut i lösning och pH värdet därmed blir lägre än i icke salt grundvatten /Toulhoat et al, 1992/.

Även i icke salta djupa vatten sjunker karbonathalten med ökad omsättningstid som en effekt av ökande pH. Det ökande pH värdet är resultat av fältspatvittring. Vid vittringen frigörs kalcium som genom utfällning av kalcit ytterligare sänker karbonathalten. Den pH-buffrande förmågan som finns hos karbonatsystemet i grundvattnet, och som bestämmer pH-värdet, är dock liten i förhållande till buffertkapaciteten i mineralerna. Den mängd kalcit som sitter på sprickyterna har större betydelse för att buffra mot försurning än karbonaterna i vattenfasen. Lika stor kapacitet finns i fältspater som även de kan buffra mot en försurning. Ett kvantitativt exempel på fältspatens kapacitet gavs i en studie i Poços de Caldas /Chapman et al, 1993/ där ett ytligt grundvatten av pH 3 genom reaktion med fältspat förändrades till 6–7 /Nordstrom, 1992/.

Kalcitmineral är en användbar indikator för inströmning av nybildat grundvatten. I områden där koldioxidrikt grundvatten infiltrerat berggrunden ser man att kalcitupplösning förekommit ner till ca 100 meters djup. I de vattenförande sprickorna kan man uppskatta andelen kalciter i sprickmineral till 5 till 40 procent. Kalcitmineralen utgör därmed en verksam och effektiv buffert mot infiltrerande surt grundvatten. Olika analyser har utförts med syfte att beskriva hur en försurning kommer att påverka grundvattensammansättningen på förvarsnivå /Wersin et al, 1994/. Slutsatserna är att kapaciteten hos bergets mineral är tillräcklig för att buffra mot alla rimliga försuringar.

**Påverkan på redoxförhållanden:** Under ostörda förhållanden som råder innan förvaret byggs och som förväntas återinträda en tid efter förslutning kan man utgå ifrån att miljön är reducerande och att grundvattnets Eh-värdet överensstämmer med järn- och sulfidmineral i berget och ligger på en nivå som gör att uran (teknetium, neptunium och plutonium) i lösning förekommer i reducerad svårslöslig form. Eh-värdet är kopplat till pH-värdet och varierar inom intervallet -100 till -400 mV för pH-värden i intervallet 7–9.

Redoxbuffertkapaciteten kommer att ligga i de tillgängliga järn- och sulfidmineralen i sprickorna. Åtskilliga experiment har genomförts både för att utreda reaktionskinetiken /Malmström et al, 1995/ och kapaciteten /Pirhonen och Pitkänen, 1991/ hos järnhaltiga mineral.

**Påverkan på sprickgeometri:** Genom den relativt snabba upplösnings- och utfällningsreaktionen med kalcit kommer flödesvägarna i berget att förändras om kemin hos det infiltrerande grundvattnet förändras. Öppna sprickor kommer att läkas och tidigare läkta sprickor kan komma att öppnas genom förändringar i vattenkemin. Effekten förväntas bli påtaglig endast vid större klimatförändringar.

Effekten av spricköppning/förslutning kan man få en uppfattning om genom att jämföra förekomst av läkta och öppna kalcitsprickor, nära markytan och på större djup. Uppskattningsvis är andelen läkta sprickor en tredjedel på djup ner till 100 m och två tredjedelar på djup större än 100 m. Det finns emellertid stora lokala variationer som beror av de platspecifika hydrologiska förhållandena.

### **Tidsperspektiv**

Upplösnings- och utfällningsreaktionerna i spricksystemen är snabba i jämförelse med vittringen av de primära mineralen. Därför har dessa reaktioner betydelse i ett förvarsperspektiv. Det är nödvändigt att beakta konsekvensen för sprickmineral av att förvaret hålls öppet och att det dröjer en tid innan de initiala ostörda förhållandena har återställts.

### **Naturliga analogier**

Vid Poços de Caldas-projektet utvärderades effekterna av medfällning för analoger till radionuklider. Betydelsen av medfällningen som retentionsprocess kunde beläggas /Bruno et al, 1996/.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Det råder i allmänhet en stor säkerhet om bildningen och kinetiken för de sprickmineral som bildats vid låga temperaturer, dvs de som fällt ut genom övermättnad i grundvattnet. Svårigheten är att hitta dessa mineral och få en uppfattning om mängderna och förekomsten bland den mycket större mängd sprickfyllnadsmineral som uppkommit under hydrotermala förhållanden. Det råder också en osäkerhet om vissa järnoxiders ursprung och där det har betydelse om de uppstått under hydrotermala förhållanden eller genom oxidation av syresatt grundvatten. Variabiliteten, co-existensen, och den rumsliga fördelningen av olika mineral är dåligt kända.

Medfällningsreaktioner är kända för vissa fasta faser och spårämnen. Det råder en stor osäkerhet om huruvida dessa reaktioner gäller generellt.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Med kunskap om de hydrokemiska förhållandena på olika platser bör man beräkna jämviktssituationen för de vanligast förekommande sprickfyllnadsmineralen, kalcit, gips, siderit, fluorit, barit, pyrit och järnsulfid. Dessa beräkningar kan användas för att beskriva stabiliteten i grundvattensystemet och kan peka på vilken riktning utvecklingen kommer att ta.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenario. Inverkan av medfällning på radionuklidtransport i geosfären försummas.

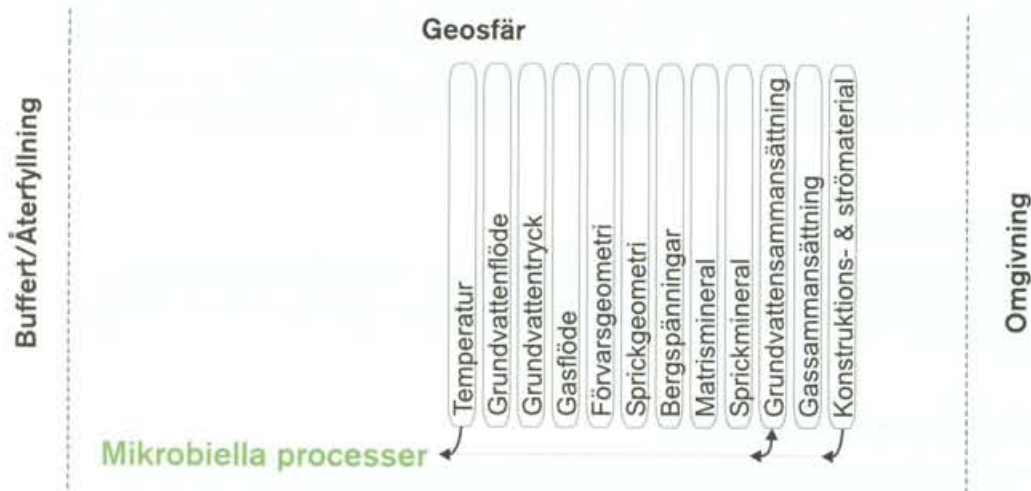
**Klimatförändringar:** Kvalitativt bör man resonera om igensättning av nu rådande flödesvägar och öppning av andra genom utfällning och upplösning av kalcit. För detta krävs kunskap om kalciternas förekomst och variabilitet på de analyserade platserna. En tillräcklig kunskap finns för Aberg, men inte för Be- och Ceberg.

Vid avsmältning av en glaciär kan syresatt vatten möjligen tränga ner till förvarsdjup. I SR 97 behandlas detta genom grundvattenmodellering /Svensson, 1999/ samt genom beräkning av syrets omsättning under transporten ned i berget /Guimera et al, 1999/. Grundvattenmodelleringen ger transporttider medan syreberäkningarna svarar på frågan om syret hinner förbrukas under nedtransporten.

**Jordskalv:** Se basscenario.



## 5.7.6 Mikrobiella processer



Figur 5-26. Mikrobiella processer.

### Överblick

Bakterier i grundvattnet kan fungera som katalysatorer för

- reaktioner där syre oxiderar organiskt material,
- oxidation av tvåvärt järn och sulfid med syre,
- reduktion av trevärt järn till tvåvärt (via oxidation av organiskt material),
- reduktion av sulfat till sulfid (via oxidation av organiskt material),
- reduktion av koldioxid till organiskt material (via oxidation av vätgas),
- reduktion av koldioxid till metan (via oxidation av vätgas eller vissa organiska föreningar).

Det organiska konstruktions- och strömmaterial som finns i förvaret kan utgöra näring för mikrober i närheten av förvaret. Även i avsaknad av organiskt material kan bakterierna utnyttja metan och vätgas som finns löst i vattnet.

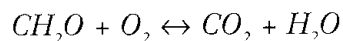
Förbrukning av syre påverkar redoxförhållandena i grundvattnet kring förvaret, en av de viktigare variablerna i den grundvattenkemiska miljön. Sulfid kan bidra till korrosion av koppar och sulfidhalterna i grundvattnet kring förvaret har därmed betydelse för kapselns isolerande funktion.

### Allmän beskrivning

Mikrobernas betydelse för grundvattnets sammansättning har på senare tid uppmärksamats och kartlagts i större detalj än tidigare /Pedersen, 1997/. Man har också konstaterat att mikroberna i speciella sammanhang förändrat vattnets kemi påtagligt. Bakterierna kan vara till fördel, som att medverka till kemisk reduktion av löst syre, eller nackdel, som att reducera sulfat till sulfid /Pedersen och Karlsson, 1995/.



**Syreförbrukning:** Bakterierna har stor betydelse då det gäller att förbruka det lösta syre som finns i infiltrerande ytvatten. Organiskt material är det huvudsakliga reduktionsmedlet och bakterierna spelar en nyckelroll som katalysatorer också i bergets sprick-system /Banwart (ed), 1995/. Tidigare har man ansett att denna reaktion endast sker i marklagret, men så är inte fallet. Förenklat kan denna process uttryckas som:



Under konstruktions- och driftfasen kommer inflödet av grundvatten till anläggningen att påverka redoxförhållandena. Den ökande vattenomsättningen i berget ovanför förvaret förväntas dock inte nämnvärt påverka vattnets redoxegenskaper. Anledningen är att ett ökat flöde av ytligt syresatt vatten kommer att balanseras av mikroberna så att allt syre ändå förbrukas. Stökiometriskt räcker det med 4 mg/l organiskt kol för att reducera 10 mg/l löst syre. Om halten organiskt material är högre kommer reduktion av trevärt järn och sulfat att ta vid då syret förbrukats /Banwart et al, 1995/.

Vid konstruktionen av förvaret kommer luftsyre i kontakt med mineral på tunnelväggar och med vatten som kommer in i anläggningen. Syret kommer med stor sannolikhet att brytas ned av bakterier efter förslutning, förutsatt att det finns rester av organiskt material i förvaret.

De flesta granitiska grundvatten innehåller metangas som avges vid markytan eller då vattnet når ett tunnelsystem. Metanoxiderande bakterier är mycket vanligt förekommande. De oxiderar metan med syre och bidrar således till syreförbrukningen i ett förvar. Metan utgör således ett viktigt komplement till organiskt material vid mikrobiell syreförbrukning. Till skillnad från halten organiskt material är metangashalten ofta konstant eller ökande med ökande djup.

**Reduktion av järn:** Då allt löst syre förbrukats fullständigt stiger ofta halterna av tvåvärt järn i grundvattnet. Det tvåvärda järnet bildas genom reduktion av trevärt järn i olika mineral med hjälp av järnreducerande bakterier, som utnyttjar organiskt material som reduktionsmedel /Chapelle och Lovley, 1992/. Ofta förekommer de högsta halterna av tvåvärt järn, 1–10 mg/l, i djupintervallet ner till 100 m varefter järnhalten sjunker till 0,01–0,1 mg/l på förvarsnivå. Anledningen är att sulfatreducerande bakterier som konkurrerar med järnreducerande bakterier om näringsämnen är mera effektiva då tillgången minskar. På större djup är tillgången av både organiskt material och näringsämnen lägre. Reduktionen av sulfat genererar sulfid, vilket faller ut järn som järnsulfid eller pyrit. Detta förklarar den minskning i järnhalt man ofta ser mot djupet. Båda dessa processer påverkar den tillgängliga redoxkapaciteten i flödesvägarna på ett gynnsamt sätt. Utfällning av järn- och sulfidmineral i flödesvägarna gör dessa tillgängliga för situationer då redoxkapaciteten kan behövas t ex för att reducera syre löst i vattnet.

**Reduktion av sulfat:** Förekomsten av bakteriell sulfatreduktion är koncentrerad till platser där tillgången på organiskt material, näringsämnen och sulfat är riklig. Detta gäller speciellt under bottensediment i Östersjön där den hydrologiska utvecklingen gjort att bergets spricksystem infiltrerats med sulfatrikt havsvatten vid ett eller flera tillfällen efter senaste istid /Laaksoharju och Wallin, 1997; Rhén et al, 1997/. En analys av förutsättningarna för en omfattande sulfatreduktion har visat att även salthalten har betydelse /Laaksoharju (ed), 1995/. Det gynnsammaste intervallet var i detta fall 3000–6000 mg/l klorid, dvs Östersjöns salthalt.

På andra platser finns sulfatreducerare som har optimala betingelser vid andra salthalter, vilket tyder på att bakterierna genom mutationer anpassar sig till rådande förhållanden.

I samband med omfattande sulfatreduktion i tunnelpartiet ut till Äspö har också ovanligt låga pH-värden registrerats: 6,8 till 7,0.

**Reduktion av koldioxid:** Metanbildande mikroorganismer reducerar koldioxid till organiskt material och metan med vätgas som energikälla. Vissa metanogener kan utnyttja acetat och många kan utnyttja föreningar med endast en kolatom såsom format, metanol, metylamin med mera. Metangas är allmänt förekommande i de flesta undersökta grundvatten. En grupp bakterier av särskilt intresse är de så kallade homoacetogena bakterierna. De reducerar koldioxid till organiskt material, bland annat acetat, med vätgas som energikälla och utgör således en länk mellan vätgas och acetatutnyttjande mikrober (metanogener, järn och sulfatreducerande bakterier). De homoacetogena bakterierna har påträffas i riklig mängd både i berget runt Äspölaboratoriet och i djupa finska grundvatten.

De koldioxidreducerande bakterierna får en gynnsam inverkan på ett förvar eftersom de omsätter vätgas till metan och organiskt material, vilket i sin tur kan utnyttjas av metan-, järn- och svaveloxiderande bakterier, enligt ovan.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Förutom de ovanstående studierna har stora ansträngningar gjorts för att både modellmässigt och experimentellt belägga att reducerande förhållanden råder på förvarsdjup. Under konstruktionsfasen av Äspölaboratoriet genomfördes ett experiment i syfte att klargöra vad som händer med löst syre som snabbt infiltrerar en anläggning som står öppen /Banwart et al, 1995/. Nu pågår ett annat som syftar till att öka kunskapen om vad som händer med syret som blir kvar då förvaret försluts /Puigdomenech et al, 1998/. I båda dessa studier har mikrobernas betydelse belagts och även kunna kvantifieras /Kotelnikova och Pedersen, 1998/.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

**Osäkerheter i förståelse:** Kunskapen om vilka effekter de olika mikroberna har och villkoren för deras existens är god.

**Osäkerheter i data:** Det råder en stor variabilitet i var och i vilken omfattning de olika mikrobiella processerna förekommer. Bakteriell reduktionen av syre i det ytliga berget är dock allmänt förekommande och väl belagd.

Ett speciellt förhållande som bör beaktas gäller de utfällningar av bakterier och järnhydroxid som bildas då reducerat grundvatten möter luftsyre i tunnlar. Om denna utfällning fortgår under lång tid kommer stora mängder organiskt material att deponeras på tunnelväggarna och bli kvar vid förslutning. Hur stora mängder detta rör sig om, och vilka konsekvenser detta kan få är ännu okänt.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

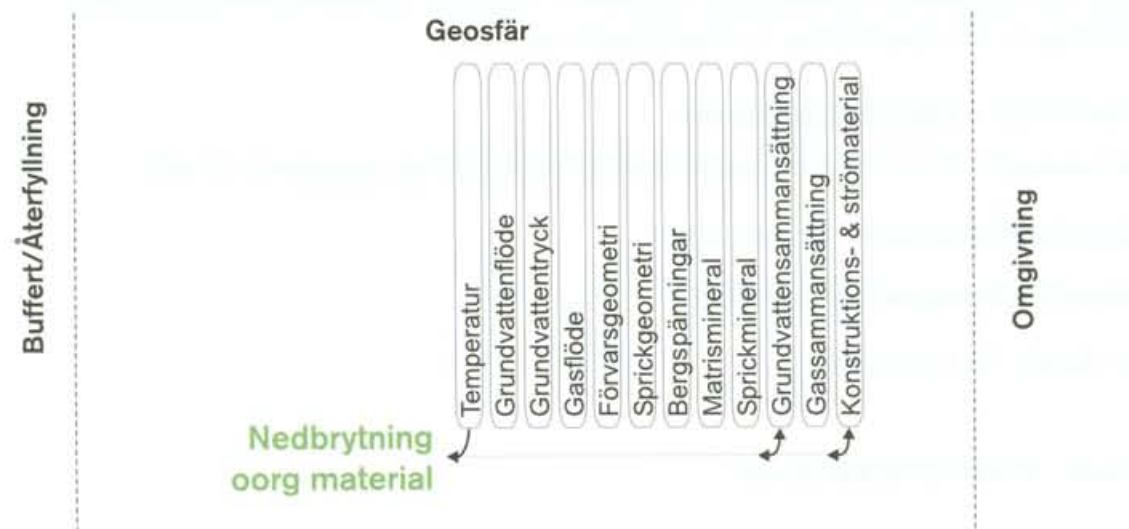
**Basscenario:** Massbalansberäkningar kan visa hur olika slags rester som blir kvar i förvaret kommer att reagera. Man kan utgå ifrån att allt organiskt material kommer att utgöra näring för mikrober. Dessutom kommer tillgången på vätgas att vara avgörande för mikrobiell aktivitet på längre sikt. Detta betyder att man får räkna med en ökad effekt av mikrobiell aktivitet tills allt organiskt material förbrukats, därefter med en aktivitet som styrs av tillflödet av vätgas. Detta innebär att syre, järn, sulfat och koldioxid kommer att reduceras. Omfattningen av dessa reaktioner är beroende av massflöden. I SR 97 förs kvalitativa resonemang om dessa processer.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenario. Bakterierna kan dessutom fungera som bärare av nuklider och därigenom få viss betydelse för nuklidtransport, se avsnitt 5.8.

**Klimatförändringar:** Avsaknad av ett jordlager med syreförbrukande bakterier kan leda till ökad nedträngning av syrehaltigt vatten. Se Reaktionen grundvatten-bergmatris ovan för effekter av detta.

**Jordskalv:** Se basscenario.

### 5.7.7 Nedbrytning av oorganiskt konstruktionsmaterial



Figur 5-27. Nedbrytning av oorganiskt konstruktionsmaterial.

#### Överblick

Organiska material som inte är kemiskt stabila i ett djupförvar kommer att brytas ned och i huvudsak påverka vattensammansättningen. Järn och stål kommer att korrodera under vätgasbildning medan upplösning av cement och betong lokalt kan påverka vattnets pH.

#### Allmän beskrivning

**Stålkorrosion:**  $\text{Fe} + \text{H}_2\text{O} = \text{FeO} + \text{H}_2$ . Stål korroderar under vätgasbildning och ger inga påtagliga effekter på vattenkemin.

**Upplösning av cement och betong:** Cement och betong kan i princip påverka vattnets pH men har förmodligen ingen betydelse eftersom betongupplösningen förväntas gå långsamt och mängderna i förvaret förväntas vara små. Vid tätning av vattenförande partier i tillfartstunnlar i berget används också cement. Erfarenheterna från de injekteringar som gjordes i Äspötunneln är att även stora mängder cementbruk ger små och kortvariga förändringar i grundvattnets pH /Rhén et al, 1997/.

### Naturliga analogier

Silikatmineral i granitisk berggrund reagerar med hydroxidjoner som kan härröra från cement. Silikatmineralen löses upp till följd av hydrolysreaktioner, varefter sekundära reaktionsprodukter fälls ut. Reaktionsförloppet har studerats vid de hyperalkaliska källorna i Maqarin i Jordanien /Smellie (ed), 1998/. Reaktionshastigheten är okänd, men man bedömer att reaktionen kan sänka pH-värdet från ca 13 till 10–11 och att det förmodligen är ett ytterligt tunt skikt av mineralen som reagerar.

### Sammanfattning av osäkerheter

Osäkerheterna ligger i mängderna material som blir kvar och var i förvaret dessa finns. Idag kan ungefärliga totalmängder uppskattas. Var dessa är koncentrerade och hur i förhållande till varandra kan ha betydelse för analysen.

### Hantering i säkerhetsanalysen

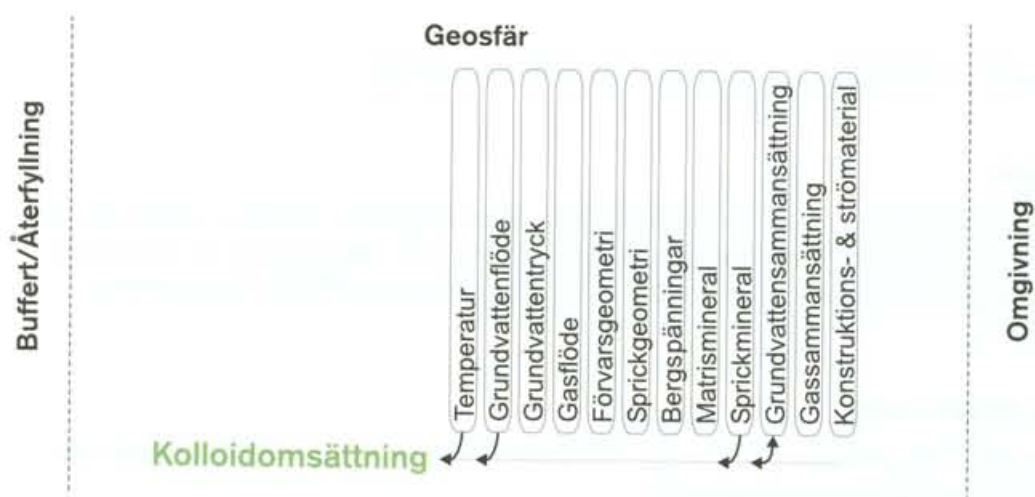
**Basscenario:** Processen försummas med hänvisning till att mängderna är små.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenario.

**Klimatförändringar:** Se basscenario.

**Jordskaly:** Se basscenario.

## 5.7.8 Kolloidomsättning



Figur 5-28. Kolloidomsättning.

### Överblick

Kolloidala partiklar kan bildas i grundvattnet som resultat av kemiska reaktioner t ex vid övermättnad då två olika typer av vatten blandas. De kan också bildas till följd av erosion. Radionuklider kan sorbera till (fastna på) kolloidala partiklar och transporteras med dessa. Det är därför viktigt att uppskatta i vilken utsträckning sådana kan förekomma eller bildas i grundvattnet.

### **Allmän beskrivning**

Kolloidbildning kan ske till följd av övermättnad i vatten eller genom växelverkan mellan fasta material och vattenlösning. I det djupt liggande grundvattnet är halterna mycket låga vilket gör att man kan anta att kolloiderna, om de bildas, inte är stabila under dessa kemiska förhållanden.

Transport av kolloider kan ske i vattenförande sprickor på samma sätt som för lösta ämnen med den skillnaden att kolloidala partiklar inte påverkas av matrisdiffusion.

Kolloider är små partiklar som inte sedimenterar. En praktisk definition av kolloidalt material är den fraktion som passerar genom ett 0,45 $\mu$  filter, dvs har en diameter som understiger 450 nm. Dessa små partiklar kan vara konglomerat av molekyler och föreningar som t ex järnhydroxider eller enskilda stora organiska molekyler. En speciell grupp av "kolloider" utgör bakterierna. Det finns ingen nedre gräns för kolloiders storlek. Gränsen mellan lösta hydratiserade ämnen och kolloider är därmed diffus.

Kolloider förekommer allmänt och rikligt i ytligt vatten men är sällsynta i djupa grundvatten. Halterna av kolloidalt material är så låga, mindre än 0,05 mg/l, att man kan anse att blandning och utfällning samt kemisk vittring inte genererar stabila kolloider i halter som har betydelse /Laaksoharju et al, 1993/.

Däremot ger minsta inblandning av luftsyre i ett reducerande grundvatten upphov till en omfattande kolloidbildning. Efter förslutning av förvaret kan man tänka sig att vattnet under en övergångstid innehåller höga halter av kolloidalt material, uppskattningsvis några till några tiotals ppm /Wikberg, 1987/.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Kolloider har modellerats och undersökts experimentellt i många olika sammanhang, bland annat som ett separat EU projekt med deltagare från ett antal forskningsinstitut /Kim et al, 1996/. Däremot är inga *in situ* experiment kända. Under de reducerande förhållandena i berggrunden är halterna oftast så låga att de inte kan mätas. Ett värde på 0,05 mg/l har uppskattats utifrån en värdering av uppmätta halter och en bedömning av osäkerheterna i dessa värden. Värdet är pessimistiskt högt. Utvärderingen är baserad på ett experimentellt arbete som utförts i samarbete mellan SKB och TVO på Olkiluoto /Laaksoharju et al, 1993/.

### **Tidsperspektiv**

En omfattande kolloidbildning kan förväntas i samband med att förvaret sluts då man får en blandning mellan oxiderande och reducerande vatten. Kolloiderna förväntas föras bort av det strömmande grundvattnet. Tiden detta tar bestäms av grundvattenflödet och förväntas vara maximalt några år.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Bildning av kolloider är beroende av flera faktorer som idag inte är fullständigt kända. I motsats till ämnen som finns lösta i vatten går det inte att ansätta jämviktsvillkor för kolloider.



## Hantering i säkerhetsanalysen

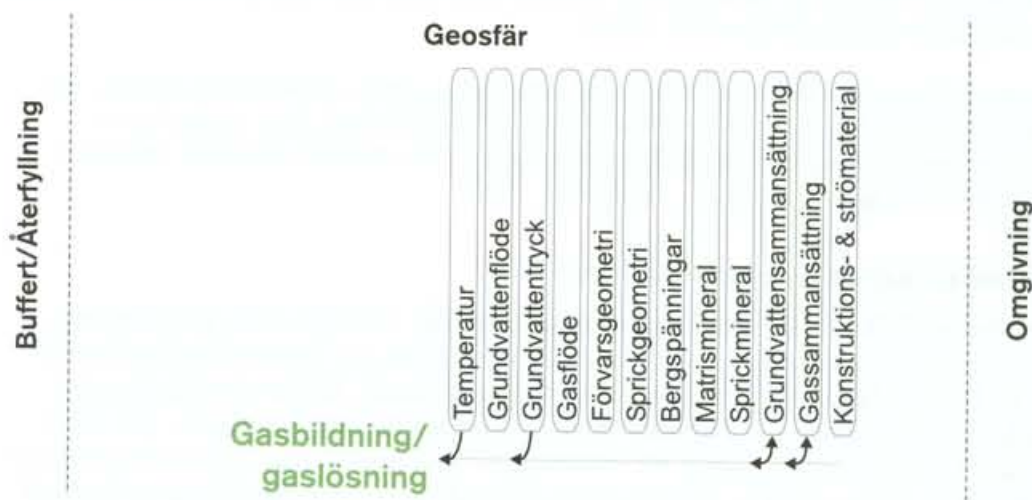
**Basscenario:** Kring förslutningen av förvaret förväntas temporärt en omfattande kolloidbildning. En kort tid efter förslutning och framåt förväntas koncentrationen av kolloider vara mindre än 0,5 mg/l /Laaksoharju et al, 1998/. Kolloiderna saknar betydelse i basscenariot.

**Kapseldefektscenario:** Tidigare beräkningar har visat att de förväntade kolloidkoncentrationerna saknar betydelse för radionuklidtransport /Allard et al, 1991/. För ytterligare diskussion, se avsnitt 5.8.

**Klimatförändringar:** Vatten med extremt låg halt av lösta salter kan erodera bentonitbufferten varvid kolloider kan tänkas bildas. Ett sådant vatten kan tänkas komma ner till förvaret i samband med avsmältningen av en inlandsis. Detta behandlas i avsnitt 4.7.7.

**Jordskalv:** Se basscenario.

### 5.7.9 Gasbildning/gaslösning



Figur 5-29. Gasbildning/gaslösning.

#### Överblick, allmän beskrivning, modellstudier/experimentella studier

Alla gasformiga ämnen kan lösas i vatten. Lösligheten för de olika gaserna varierar och är beroende av både hydrostatiskt tryck och temperatur. Lösligheten anges ofta vid 25 °C och 1 atmosfärs tryck (NTP = normal temperature and pressure), av gasen i fråga. Om flera gaser tillsammans bidrar till det totala trycket är lösligheten för de individuella gaserna proportionell mot partialtrycket dvs, den andel av trycket den individuella gasen bidrar med. En gasblandning vid 1 atmosfär som består av lika andelar kväve och väte har vardera partialtrycket 0,5 atmosfärer. I en vattenlösning som står i jämvikt med en sådan gasblandning är då halten av de lösta gaserna endast hälften av den som är löslig vid en ren gasfas.

Lösligheten ökar i proportion till det hydrostatiska trycket, dvs på 500 m djup är lösligheten 50 gånger högre än vid motsvarande temperatur vid markytan. Om flera gaser är lösta bidrar deras partialtryck till totaltrycket. Om gasernas sammanlagda partialtryck överstiger det hydrostatiska trycket bildas en separat gasfas. Denna gasfas består då av en blandning av alla de lösta gaserna i proportion till deras partialtryck. En sådan avgasning sker t ex då djupt liggande grundvatten pumpas upp till markytan för provtagning.

Grundvattnet innehåller varierande mängd löst gas. Oftast dominerar kväve följt av metan, koldioxid, helium, argon, väte med flera. Ibland kan höga halter av väte och metan förekomma. Den totala mängden löst gas varierar kring 5 volymprocent (NTP) och är generellt högre mot djupet. Det finns också platser där mycket högre gashalter påträffats, upp till 1000 ml gas per liter grundvatten, och där sammansättningen varit helt annorlunda med väte och/eller metan som de dominerande komponenterna /Sherwood et al, 1993; Pitkänen et al, 1998/.

Det finns olika hypoteser om ursprunget till gas som finns löst i grundvatten. Låga halter kan förklaras med att infiltrerat grundvatten varit mättat med avseende på de gaskomponenter som finns i luften. Genom reaktioner har sedan syret förbrukats medan de övriga komponenterna återfinns i samma proportion som i luft. Mycket höga halter av väte och metan som lokalt påträffats antas härröra från uppströmning från jordens inre, eller vara resultat av omfattande bakteriell aktivitet /Pedersen, 1997/.

### ***Sammanfattning av osäkerheter***

**Osäkerheter i förståelse:** Den grundläggande förståelsen av processen är mycket god.

**Osäkerheter i data:** De reaktionskonstanter som behövs för att beskriva processen är i allmänhet väl kända.

Mängden löst gas varierar som tidigare nämnts kraftigt. Den stora variationen som uppmäts på olika platser är sannolikt kopplad till varierande förekomst av mikrober. Dessutom kan en del av variationen beror på att gas kommer från stort djup och har genererats i berget medan annan gas kommer uppifrån markytan.

### ***Hantering i säkerhetsanalysen***

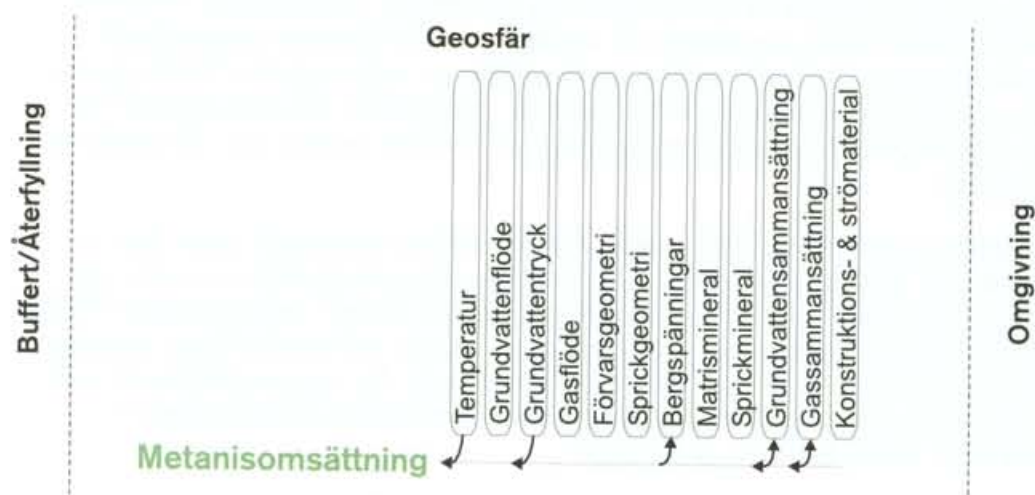
**Basscenario:** Ingen gasbildning/gaslösning av betydelse för förvarets utveckling förväntas i basscenariot. Halter av lösta gaser förväntas förbli samma som de nu rådande.

**Kapseldefektsscenario:** Till situationen i basscenariot kommer eventuell vätgas från en korroderande gjutjärnsinsats, se vidare avsnitt 4.5.3. Eventuell transport av radionuklider i en separat gasfas behandlas i avsnitt 5.8.

**Klimatförändringar:** Se basscenario samt avsnitt 5.7.10.



### 5.7.10 Metanisomsättning



Figur 5-30. Metanisomsättning.

#### Överblick, allmän beskrivning

Vid de tryck och temperaturer som råder under en glaciation kan vatten och metangas förenas till en fast fas, s k metanis under omsättning av små energimängder. Omvandlingen från den fasta metanisfasen till vatten och metangas kan ge upphov till en volymsförändring som påverkar berget, speciellt om stora mängder omvandlas samtidigt.

Metanibildning kan ske vid markytan direkt under en tjock glaciär, eller under en permafrost som når ner till 150 m djup, eller djupare. Man kan anta att det endast är i starkt vattenförande spricksystem som man har förutsättning för att få en upptransport och anrikning av metan. Därmed är det också där som metanis kan bildas. I naturen har metanis observerats i havssediment och under permafrost. Det är föga troligt att metanibildning i ett djupförvar kommer att ske i en omfattning som har betydelse för förvarets säkerhet. För att så ska vara fallet måste metan förekomma i gasfas på 500 m djup för att tillsammans med vatten bilda metanis. Lösligheten för metan är 4 g/l vid normaltryck och 20°C. För att förekomma i gasfas på förvarsnivå vid där rådande hydrostatiska tryck krävs en halt på över 200 g/l löst metan, eller att andra gaser också finns lösta i vattnet i mycket hög halt. Verkliga halter av löst gas är alltid mycket lägre /Hermansson et al, 1991a, b/.

#### Sammanfattning av osäkerheter

**Osäkerheter i förståelse:** Metanibildning är en fysikaliskt välkänd process.

**Osäkerheter i data:** Dataosäkerheter rör förutsättningarna för att metanis ska bildas i anslutning till ett djupförvar, och främst kombinationen av att en permafrost når ner till förvarsnivå samtidigt som metan förekommer i gasfas på förvarsnivå.

### Hantering i säkerhetsanalysen

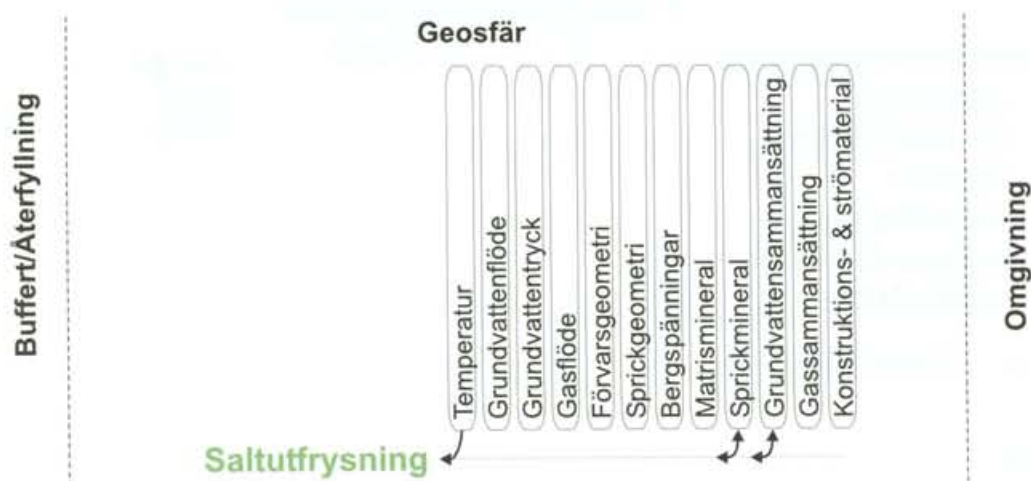
**Basscenario:** Inte relevant.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenario.

**Klimatförändringar:** Dagens kunskap antyder att denna process saknar betydelse för djupförvarets säkerhet under en glaciation.

**Jordskalv:** Se basscenario.

## 5.7.11 Saltutfrysning



Figur 5-31. Saltutfrysning.

### Överblick och Allmän beskrivning

Vid långsam frysning av vatten kommer lösta ämnen inte att inkorporeras i kristallgittret för isen. Då kommer allt salt som funnits i vattnet att skjutas framför isfronten. Detta antas också kunna ske vid en permafrost, förutsatt att frysningen sker långsamt och kontinuerligt. Denna process kunde om den upprepades ett antal gånger ge upphov till en relativt skarp gräns mellan sött och salt vatten på det djup till vilket permafrosten nått.

### Sammanfattning av osäkerheter

Det är tveksamt om saltutfrysning förekommer i den omfattning att processen har en påtaglig betydelse för fördelning av salt och sött vatten.

### Hantering i säkerhetsanalysen

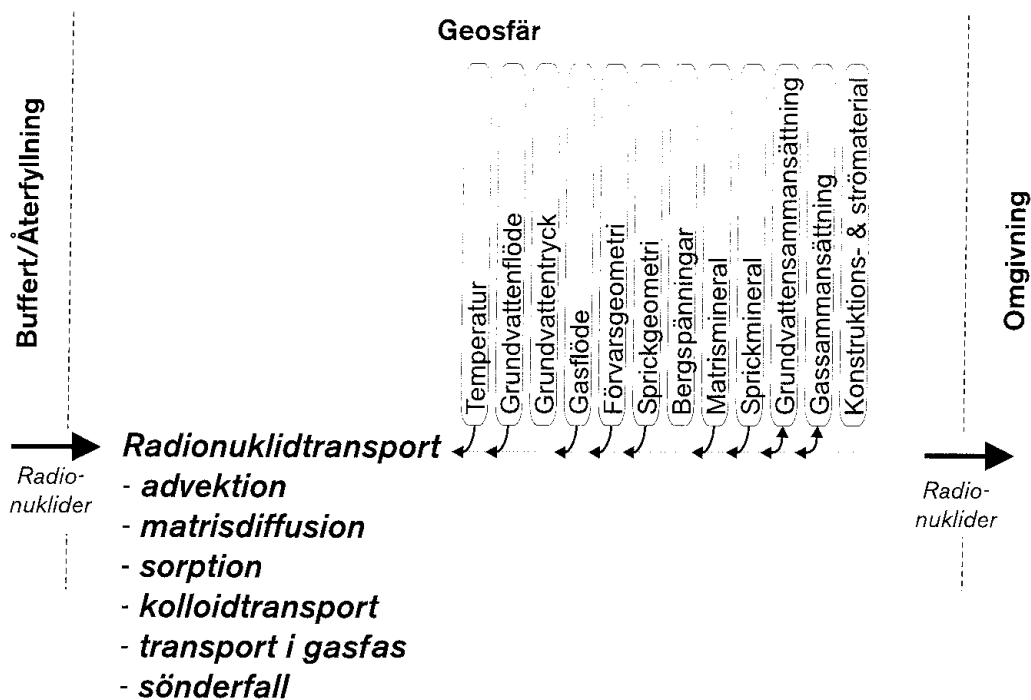
**Basscenario:** Inte relevant.

**Kapseldefektscenario:** Se basscenario.

**Klimatförändringar:** Saltutfrysning är en process som sannolikt saknar betydelse för förvarets säkerhet och som därför inte beaktas i analysen.

**Jordskalv:** Se basscenario.

## 5.8 Radionuklidtransport



Figur 5-32. Radionuklidtransport.

### Överblick

Radionuklider kan transporteras med det strömmande grundvattnet, *advektion*. Även *diffusion* kan vara betydelsefull under stagnanta förhållanden. En viktig aspekt av detta är *matrisdiffusion* dvs att radionuklider diffunderar in i det stagnanta vattnet i bergets mikrosprickor och på så sätt undandras och transporteras långsammare än det flödande vattnet. Tidsskalan för advektion relativt tidsskalan för matrisdiffusion bestämmer den senare processens relativa betydelse. Av avgörande betydelse för radionuklidtransporten är även *sorption*, dvs det faktum att radionuklider kan sorbera (fastna) på spricksystemets och bergmatrisens ytor. Matrisdiffusion och sorption är de två viktigaste retentionsprocesserna för radionuklider i geosfären. En annan faktor som kan ha betydelse för retentionen är sorption på *kolloidala partiklar* och transport med dessa. Den kemiska miljön i vattnet bestämmer vilken *speciering* (kemisk form) radionukliderna kommer att ha, vilket är avgörande speciellt för sorptionsfenomenen. Vissa nuklider kan transporteras i *gasfas*. Det *radioaktiva sönderfallet* slutligen påverkar innehållet av radionuklider i grundvattnet och måste därför inkluderas i beskrivningen av transportfenomenen.

### 5.8.1 Advektion och dispersion

#### Allmän beskrivning

I avsnitt 5.5.1 beskrivs processerna som styr grundvattenflödet genom geosfärens sprickiga berg samt hur ett integrerat flöde, darcyhastigheten, genom berget kan beräknas. I avsnitt 5.7 beskrivs hur processerna advektion och dispersion kan leda till blandning av grundvatten, samt hur den grundvattenkemiska miljön påverkas av dessa blandningsförhållanden. Nedan beskrivs hur processerna advektion och dispersion påverkar transport av radionuklider.

Bergets volym upptas endast till en mycket liten del av håligheter som sprickor och porösa strukturer i det intakta berget. Grundvattnet strömmar i dessa håligheter, men enbart genom sprickor som är hydrauliskt förbundna och genom den andel av sprickvolymen som är öppen för flöde. Flödesporositeten, som är mindre än bergets totala porositet, är den andel av berget som upptas av flödande grundvatten. Det totala grundvattenflödet per areaenhet kallas för darcyhastigheten. Vattenpartiklarnas medeltransporthastighet erhålls som darcyhastigheten dividerat med flödesporositeten. Denna resulterande transportprocess beskriver grundvattnets bulkrörelse och kallas för advektion.

Darcyhastigheten är definierad på en makroskopisk skala; på mindre skalor förekommer hastighetsskillnader för flödet inom en spricka samt hastighetsskillnader mellan olika sprickor. Dessa hastighetsvariationer leder till blandningsfenomen som kallas hydrodynamisk dispersion. Vid transport i sprickigt berg dominerar dispersionen oftast av hastighetsvariationer mellan olika strömningsvägar.

Uppdelningen av transport i en advektiv och en dispersiv komponent är beroende av den studerade skalan och är relativt godtycklig. Den advektiva delen beskriver medelförflyttningen medan den dispersiva delen tar hänsyn till effekter av heterogenitet i berget och hastighetsvariationer på skalor mindre än den som beskrivs av advektionen. Dispersion innehåller även en komponent som beskriver ren molekylär diffusion i vatten. Dispersion är ett modellkoncept snarare än en verklig process.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Vid modellering av spårämnesförsök används ofta det så kallade advektions-dispersionskonceptet. Detta koncept uttrycker i sin enklaste endimensionella formulering att massflödet är proportionellt mot den advektiva hastigheten multiplicerat med koncentrationen i vattenfasen och mot en dispersionskoefficient multiplicerat med koncentrationsgradienten. Dispersionskoefficienten uttrycks ofta som en konstant (longitudinell dispersivitet) multiplicerat med den advektiva hastigheten.

Ett flertal kombinerade studier har gjorts där experiment utförts i fält och samtidigt har modellerats. I Sverige har försök utförts t ex i Stripa gruva /Gnirk, 1993; Olsson och Gale, 1995/, i Finnsjön /Ahlbom et al, 1992/ samt vid Äspölaboratoriet /Gustafson och Ström, 1995; Elert, 1999/.

Det har vid modellering med advektions-dispersionskonceptet ofta visat sig vara svårt att *á priori* uppskatta parametrar för den advektiva och dispersiva transporten utifrån enbart hydrauliska data såsom flöden och tryck. För den advektiva delen består problemet i att bestämma en relevant flödesporositet för beräkning av vattnets medelhastighet. Vidare har det visat sig att dispersivitetskonceptet inte fungerar generellt vid hög rumslig variabilitet i sprickigt berg; bland annat har ett skalberoende för dispersionen konstaterats. Betydelsen av dessa aspekter berörs nedan under Hantering i säkerhetsanalysen.

### **Tidsperspektiv**

Vid modelleringsstudier har man typiskt erhållit advektiva transporttider från förvaringsplatser upp till biosfären i storleksordningen tiotals till hundratals år /SKB 91, 1992; Svensson, 1997b/. Dispersionen påverkar inte i betydande omfattning dessa tidsperspektiv. Det är viktigt att konstatera att dessa advektiva transporttider är rena modellresultat utan motsvarighet i de verkliga systemen; en verklig "vattenpartikel" utsätts för både diffusion och matrisdiffusion (se nedan) och har därmed längre transporttider. Vidare är de ovan refererade transporttiderna proportionella mot den antagna porositeten som inte är väl känd i sprickigt berg (se Sammanfattning av osäkerheter nedan).

### **Sammanfattning av osäkerheter**

De konceptuella osäkerheterna kring advektion får anses vara mycket små. Processen i sig förstås väl, men den naturligt förekommande rumsliga variabiliteten i hydraulisk konduktivitet innebär att även grundvattenflöde och advektiva hastigheter varierar i rummet. Vid modellering kan denna variabilitet innebära en osäkerhet för transportprediktioner. Även svårigheterna att uppskatta flödesporositeten (se ovan) innebär en osäkerhet vid bestämning av den slutliga advektiva hastigheten. För transport av sorberande radionuklider spelar den advektiva hastigheten dock en underordnad roll (se Sorption och Matrisdiffusion nedan); därmed är den resulterande osäkerheten i advektion inte bekymmersam.

Konceptualiseringen av hastighetsvariationer som en dispersionsprocess är mer problematisk; andra angreppssätt kan vara nödvändiga för att uppnå en fullgod beskrivning. Alternativa angreppssätt beskrivs mer utförligt nedan under Hantering i säkerhetsanalysen.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Vid basscenariot förväntas ingen radionuklidtransport. Om analysen av basscenariot ändå skulle resultera i kapselskador, hanteras radionuklidtransport såsom i kapseldefektscenariot nedan.

**Kapseldefektscenariot:** I SKB:s säkerhetsanalys SR 97 används tre olika konceptualiseringar för grundvattenflöde och -transport: diskret sprickmodell, kanalnätverksmodell, samt stokastisk kontinuum-beskrivning. I samtliga modeller erhålls en storskalig blandning genom explicit modellering av variation i advektiv hastighet mellan olika transportbanor. I de diskreta modellerna utgör enskilda sprickor transportvägar medan en rumslig konduktivitetsfördelning utgör grund för partikelbanor med varierande hastighet i kontinuum-modellerna. Denna storskaliga blandning är den dominerande komponenten i vad som kan kallas för dispersion. Den explicita modelleringen av dessa hastighetsvariationer sörjer sålunda för att användningen av det något problematiska konceptet dispersion kan minimeras till småskaliga hastighetsvariationer (dvs hastighetsvariationer på skalor mindre än den explicit modellerade skalan). De enskilda partikelbanorna utgör grund för en samling endimensionella strömrör genom vilka radionuklidtransport beskrivs i SR 97.

Spridning/blandning längs med det enskilda strömröret modelleras vanligen genom en dispersionsterm där det dispersiva massflödet är proportionellt mot en dispersionskoefficient. Dispersionskoefficienten ges, såsom beskrivits ovan, av grundvattnets hastighet och en koefficient kallad longitudinell dispersivitet (dispersionslängd). Dispersionslängderna kan vara mycket osäkra att uppskatta beroende på svårigheten att utföra spårförsök i sprickigt berg över lämpliga längdskalor. Transversell dispersion är ofta mycket mindre än den longitudinella. Det skalberoende för dispersionskoefficienten som har konstaterats i fält simuleras ibland genom användandet av en dimensionslös konstant, det s k Peclets tal. Peclets tal representerar kvoten mellan advektiv och dispersiv transport. Parametern ingår i den advektions-dispersionsformulering för transport i berget som utnyttjas i SR 97 /Norman och Kjellbert, 1990/. Osäkerheter i dispersion hanteras i SR 97 genom användandet av ett intervall för Peclets tal /Andersson et al, 1998; Andersson, 1999/, dock är effekten av denna osäkerhet liten.

**Klimatförändringar och jordskalv:** Dessa scenariers inverkan på grundvattenflöde och transport är beskrivna i avsnitt 5.5.1. Om ett behov av radionuklidberäkningar föreligger utnyttjas samma transportmodeller som för kapseldefektscenariot men med flödesvägar och hastigheter representerande det aktuella scenariot. För SR 97 finns dock begränsningen att transporten beskrivs med strömrör; definitionen av dessa grundar sig på en grundvattenströmning som inte förändrar sig i tiden. Sålunda måste man inom varje scenario definiera finita tidsperioder med ungefärligen konstanta strömningsförhållanden.

## 5.8.2 Sorption

### *Allmän beskrivning*

Termen sorption innefattar en rad olika retentionsprocesser/mekanismer som resulterar i att ett ämne (radionuklid) transporterat löst i grundvatten immobiliseras (fastnar) på bergets fasta ytor. De viktigaste mekanismerna är jonbyte och ytkomplexering /Carbol och Engkvist, 1995/. Sorptionen kan för vissa radionuklider vara praktiskt taget irreversibel och resulterar då i permanent immobilisering av nukliden. I dessa fall inkorporeras nukliden i mineralgittret. För de mängder radionuklider som har potential att immobiliseras kan man anse att geosfärens sorptionsförmåga är obegränsad, dvs sorptionen kommer inte att försvagas med mängden tidigare sorberat material.

Sorption kan ske direkt på de vattenförande sprickornas ytor eller på mikrosprickornas ytor inne i bergsmatrisen där vattnet är mer eller mindre stagnant. Vidare kan sorption ske på annat material, t ex lermineral, som kan förekomma på de vattenförande sprickytorna.

Beroende på aktuell process är styrkan i sorptionen starkt beroende av jonernas kemiska egenskaper och förekomst av eventuella komplexbildare. Därför är det väsentligt att känna till redoxförhållanden, grundvattnets pH, och innehåll av komplexbildare såsom t ex humus- och fulvosyror, avsnitt 5.7.5. Nuklidernas kemiska form (speciering) styrs bland annat av aktuella redoxförhållanden; sorptionsegenskaperna är för vissa nuklider betydligt starkare vid reducerande förhållanden. Komplexbildning i vattenfasen kan sänka sorptionen för en del av radionukliderna. Sänkningens storlek beror på radionuklidens form och laddning och på halten humusämnen i grundvattnet. Vid jonbyte är även vattnets salthalt av stor betydelse. Hög salthalt minskar t ex sorptionen av Cs<sup>+</sup> och Sr<sup>2+</sup> /Carbol och Engqvist, 1997/.

De mineral som utgör själva substratet för sorptionen har olika kapacitet att ta upp radionuklider. Vissa mineral är t ex goda jonbytare medan andra inte är det. Lermineral och järnoxyhydroxider har stor kapacitet att binda nuklider.

Även en rad andra processer än jonbyte och ytkomplexering påverkar fördelningen av nuklider mellan vätskefas och fast fas. Fällningsreaktioner samt medfällning (mineralisering) har identifierats som viktiga processer som kan bidra till retentionen av radionuklider /Grenthe och Puigdomenech, 1997/. Dessa processer, som är starkt beroende av radionuklidernas speciering och vattnets mättnad med avseende på de aktuella specierna, brukar dock inte betecknas som sorptionsreaktioner.



### **Modellstudier/experimentella studier**

En stor mängd experimentella, nuklidspecifika studier av sorption har genomförts /Carbol och Engkvist, 1995/. Dessa test utförs oftast som batchförsök där ett prov innehållande den aktuella nukliden i vattenlösning får ställa sig i jämvikt med det fasta bergmaterialet. Man använder mineral och vattensammansättningar som är typiska för förvarsplatsen och varierar sedan de parametrar som är betydelsefulla såsom pH, jonstyrka och koncentration av radionuklider. Ändringen av nuklidens vattenkoncentration ger ett mått på sorptionen. Även kolonnförsök med strömmande vatten kan användas för att uppskatta sorptionen. I fält har man försökt uppskatta sorptionen direkt genom att bestämma fördelningen av spårämne mellan sprickytor och motsvarande grundvatten i borrhål /Landström och Tullborg, 1990/. Även genom transportexperiment i fält med sorberande spårämnen kan uppskattningar av sorptionsprocessens styrka göras /Frick et al, 1992; Winberg et al, in prep/.

Om sorptionen är linjär, fullständigt reversibel och jämvikt råder kan en fördelningskoefficient för aktuell vattenkemi,  $K_d$ , uppskattas. Linearitetsantagandet är oftast uppfyllt vid de låga koncentrationer som är av intresse medan jämviktsantagandet är uppfyllt om sorptionen har en tidsskala som är mycket kortare än tidsskalan för transport med advektion och dispersion. Användandet av  $K_d$  innebär en förenkling av de förhållandevis komplexa sorptionsprocesserna. Modeller som tar hänsyn till icke-linjär sorption och/eller icke-jämviktsförhållanden existerar, men används sällan i säkerhetsanalyser.

### **Tidsperspektiv**

För de flesta nuklider anses sorptionsprocessen, speciellt jonbyte, vara snabb jämfört med tidsskalan för advektiv transport i sprickigt berg. Detta innebär att jämvikt mellan bergmaterial och vattenfas oftast råder under naturliga förhållanden.

Processer såsom inkorporering av nuklider i mineralgittret är däremot betydligt långsammare än jonbyte och kan inte anses vara i jämvikt med berget. Eftersom dessa processer dock inte utnyttjas i säkerhetsanalysen (se nedan) är detta långsamma tidsperspektiv inte bekymmersamt.

### **Naturliga analogier**

Behandlas nedan under processen matrisdiffusion.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Då sorption är ett samlingsnamn på flera processer kan man hävda att den konceptuella förståelsen varierar. Användandet av förenklingen med fördelningskoefficienten  $K_d$  är konceptuellt och hanteringsmässigt attraktivt; dock kan angreppssättets validitet ifrågasättas under vissa specifika förhållanden då konceptets förutsättningar inte är uppfyllda. Som diskuterats ovan är dock både linearitets- och jämviktsförutsättningarna uppfyllda för de förhållanden som är aktuella i säkerhetsanalysen. Sålunda innebär inte konceptets validitet i sig en osäkerhetsfaktor givet säkerhetsanalysens syfte.

Den största enskilda osäkerhetsfaktorn som påverkar  $K_d$ -värdet är grundvattenkemins variabilitet /Bruno och Duro, 1997/. Givet samtliga osäkerheter väljer man i säkerhetsanalyser  $K_d$ -värden (se nedan) så att retentionsförmågan inte överskattas, dvs försiktigt pessimistiska värden utnyttjas.



Sorption genom ytkomplexering kan principiellt även beskrivas med ytkomplexeringsmodeller. Dessa modeller är generella och välgrundade men kräver en stor mängd termodynamiska data för det sorberande ämnet. Vidare krävs ytkomplexeringskonstanter som är svåra att mäta för alla tänkbara kombinationer av nuklider och mineral. Därför har resultat av olika experiment med ytkomplexeringsmodeller inte använts för att ersätta fördelningskoefficienterna ( $K_d$ -värden), utan för att öka förståelsen av sorptionsmekanismerna och bestämma vad de är beroende av, dvs hur pålitlig sorptionen kan anses vara /Carbol och Engkvist, 1995; Olin och Lehikoinen, 1997/.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Vid basscenariot förväntas ingen radionuklidtransport. Om analysen av basscenariot ändå skulle resultera i kapselskador, hanteras radionuklidtransport såsom i kapseldefektscenariot nedan.

**Kapseldefektsscenario:** I säkerhetsanalysen används modeller baserade på antagandet om att sorptionen i bergmatrisen kan förenklas och modelleras med den linjära jämviktsmodellen (utnyttjande av  $K_d$ ). Detta innebär att retentionsprocesser såsom t ex mineralisering inte utnyttjas för säkerhetsanalysen.

För att inte överskatta sorptionen vid förändringar av vattenkemin ansätts försiktigt pessimistiska fördelningskoefficienter /Carbol och Engkvist, 1995; Carbol och Engkvist, 1997/. Inom SR 97 används t ex olika  $K_d$  för icke-salint samt salint vatten, samt i relevanta fall för olika redoxformer. I princip kan  $K_d$  även kompenseras för minskning i sorption orsakad av t ex humus- och fulvosyror /Grenthe et al, 1992/; i SR 97 görs dock inte detta då koncentrationerna av organiskt material i de aktuella djupa grundvattnen är relativt låga /Carbol och Engkvist, 1997/. Vidare används i SR 97 ett osäkerhetsspann för  $K_d$  som inkluderar både experimentell osäkerhet och osäkerheter i den naturliga kemiska miljön. För en vidare diskussion om parametervärden i SR 97 hänvisas till Andersson /1999/.

**Klimatförändringar och jordskalv:** Dessa scenariers inverkan på grundvattenflöde och transport är beskrivna i avsnitt 5.5.1. Om det finns ett behov att räkna radionuklidtransport utnyttjas samma transportmodeller som för kapseldefektscenariot men med flödesvägar, kemiska förhållanden och sålunda även  $K_d$ -värden som representerar det aktuella scenariot.

### **5.8.3 Molekylär diffusion samt matrisdiffusion**

#### **Allmän beskrivning**

Transport genom molekylär diffusion sker genom att vattenlösta ämnen förflyttas från områden med höga koncentrationer till områden med låga koncentrationer. Den molekylära diffusionen i det flödande vattnet anses generellt vara underordnad effekten av advektion och dispersion. Vid stagnanta förhållanden i bergets sprickor kan dock processen vara väsentlig. Vidare är molekylär diffusion viktig vid indiffusion till bergets vattenfyllda mikrosprickor.

Indiffusion i bergets system av förbundna mikrosprickor, s k matrisdiffusion, kan vara viktig eftersom vattnet där i praktiken är stillastående jämfört med det vatten som rör sig i de större sprickorna. Förekomsten av ett förbundet system av mikrosprickor i granitiskt berg har bekräftats med försök i både laboratorium /Skagius och Neretnieks, 1985; Skagius, 1986/ samt i fält /Birgersson och Neretnieks, 1988/. I vatten med låg jonstyrka har anjoner en lägre diffusion in i matrisen än motsvarande oladdade partiklar med i övrigt identiska egenskaper. Detta beror på en jonexklusionseffekt där de negativt laddade anjonerna repelleras från de negativt laddade porytorna och sålunda har en mindre effektiv volym till förfogande för diffusion /Ohlsson och Neretnieks, 1997/. För katjoner som undergår jonbyte kan diffusionen förstärkas genom ett fenomen kallat ytsorption. I detta fall diffunderar radionukliderna även i den sorberade fasta fasen /t ex Skagius, 1986/.

För många nuklider kommer transporten genom berget att starkt begränsas genom sorption på bergets sprickytor (se sorption ovan). Genom matrisdiffusionen ökar den tillgängliga ytan för sorption ytterligare genom att mikrosprickornas ytor exponeras för radionukliderna. Även transporten av svagt sorberande och icke-sorberande radionuklider kommer i viss mån att fördröjas av matrisdiffusion. I det stagnanta vattnet i bergsmatrisen är transport möjlig endast genom diffusion och är sålunda mycket långsam. När koncentrationen i de större vattenförande sprickorna blir lägre än i matrisen diffunderar nukliderna tillbaka från matrisen till dessa vattenförande sprickor. Sålunda är matrisdiffusion inte en irreversibel process, utan enbart en fördröjningsmekanism.

Matrisdiffusionens betydelse för transport av radionuklider bestäms förutom av matrisens diffusions- och sorptionsegenskaper även av sprickornas geometri samt flödets magnitud (den advektiva hastigheten) i sprickorna. Vid höga advektiva hastigheter minskar matrisdiffusionens transportfördröjande effekt; den diffusiva tidsskalan för transport in i matrisen blir längre relativt tidsskalan för den advektiva transporten. På motsvarande sätt ökar matrisdiffusionens transportfördröjande effekt vid lägre advektiva hastigheter vilka kan uppnås t ex då ett givet totalflöde fördelas över större sprickytor. För detta givna totalflöde har då kontaktytan (flödesvättan ytan) mellan radionuklider i vattenlösning och berg ökat samtidigt som den advektiva hastigheten minskat.

Vid antagande om en förenklad flödesgeometri, t ex flöde genom rektangulära kanaler, kan de styrande grupperna av parametrar för matrisdiffusionen uttryckas som den flödesvättan ytan dividerat med flödet genom kanalen samt en grupp parametrar innehållande  $K_d$ -värde, diffusionskoefficient samt porositet. Den flödesvättan ytan relativt vattenflödet är här en kritisk parameter för sorberande nuklider och har stor betydelse för det resulterande massflödet av nuklider i det mobila grundvattnet.

För en mer utförlig diskussion i detta ämne hänvisas till /Neretnieks, 1980; Elert et al, 1992; Olsson et al, 1994; Moreno et al, 1995; Elert, 1997/.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Den grupp av parametrar som styr sorptionskapaciteten kan bestämmas förhållandevis enkelt i laboratorium. Med diffusionsceller bestäms i första hand diffusionskoefficienter. En sammanställning av värden för användning i SR 97 har nyligen gjorts /Ohlsson och Neretnieks, 1997/. Bestämning av  $K_d$ -värden diskuteras ovan i avsnittet om sorption.

Olika metoder har föreslagits för att uppskatta den flödesvätta ytan, t ex spår försök, tunnelobservationer, mätningar i borrhål, geokemiska studier samt numeriska experiment. De olika metoderna ger en stor spridning i de skattade värdena, ofta mellan två och tre storleksordningar /Elert, 1997/. Detta beror delvis på metoden i fråga och delvis på olika egenskaper i berget. Vidare kan konstateras att det är kvoten mellan den flödesvätta ytan och flödet längs med transportvägar som är av intresse för retentionen, inte den flödesvätta ytan i sig. Detta komplicerar ytterligare mätningar i fält.

### **Tidsperspektiv**

Matrisdiffusion är en långsam process. Det är i första hand kombinationen av matrisdiffusion och sorption som ger geosfären dess retarderande förmåga. Även med advektiva transporttider på några tiotals eller hundratals år från förvar till recipient så anländer de flesta radionuklider retarderade med flera storleksordningar relativt den advektiva transporttiden.

### **Naturliga analogier**

Sprickytor kan bli rödfärgade som ett resultat av hydrotermala förändringar /Elert, 1997/. Denna rödfärgning skulle kunna användas som en indikation på kontaktyta (flödesvätt yta) mellan flödande vatten och berg. Problemet är att denna rödfärgning skedde för lång tid sedan under förhållanden vi inte känner idag, bland annat randvillkoren för vattenströmningen är okända. Eftersom kontaktytan är starkt beroende av flödessituation är det förenat med stora osäkerheter att extrapolera rödfärgningsresultat till dagens flödesvätta ytor. Vidare är det som tidigare nämnts kvoten av den flödesvätta ytan och flödet som styr retentionen; att då enbart känna den flödesvätta ytan under tidigare, kanske andra flödesförhållanden, är inte tillräckligt.

Naturliga analogier i form av geologiska formationer med förhöjd naturlig radioaktivitet kan användas för att verifiera matrisdiffusion som en process som ägt rum under långa tidsperspektiv. Denna typ av analogier som finns t ex vid Palmottu i Finland, Alligator Rivers i Australien samt Cigar Lake i Kanada erbjuder en möjlighet till förbättrad processförståelse /Miller et al, 1994/. Genom att mäta koncentrationsprofiler in situ och jämföra mot modellsimuleringar med relevanta data kan man få en uppfattning om matrisdiffusionens effekter /Rasilainen, 1997/. Överensstämmelse mellan mätta och simulerade profiler indikerar att de matrisdiffusionsmodeller som används är realistiska. Då de applicerade modellerna inkluderar sorptionsprocesser kan man hävda att analogistudierna även verifierar att kombinerad matrisdiffusion och sorption är aktiva processer in situ.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Matrisdiffusion är en process som är svår att kvantifiera och därmed behäftad med förhållandevis stora osäkerheter. Även om man i laboratorieförsök kunnat påvisa diffusion in i bergsmaterial så är det betydligt svårare att entydigt visa detta under fältförhållanden; dock erbjuder de naturliga analogierna bevis för att matrisdiffusion äger rum (se ovan). Vidare är begreppet flödesvätt yta (specifik yta, kontaktyta, våt yta etc) behäftad med betydande konceptuella osäkerheter; konceptet är uppenbart i en geometriskt förenklad flödesmodell, men frågan är om dessa modeller realistiskt kan beskriva effekten av matrisdiffusion under naturliga strömningsförhållanden. Ytterligare utveckling av modellkoncepten och själva begreppet flödesvätt yta krävs för att entydigt besvara denna fråga.

## **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Vid basscenariot förväntas ingen radionuklidtransport. Om analysen av basscenariot ändå skulle resultera i kapselskador, hanteras radionuklidtransport såsom i kapseldefektscenariot nedan.

**Kapseldefektscenario:** I SR 97 utnyttjas modellen FARF31 /Norman och Kjellbert, 1990/ för att beskriva transport genom berget. Modellen löser transportekvationerna längs endimensionella strömrör (se Advektion och dispersion ovan) och baseras på en dubbelporositetsbeskrivning med advektion-dispersion i den mobila fasen (strömmande vatten) och diffusion i den immobila bergsmatrisen. En utbyteterm mellan de två medierna tas med vid beräkningarna. I modellen kan penetrationsdjupet för radionuklider i bergmatrisen specificeras. Om t ex bergets sprickor ligger tätt blir matrisens utsträckning mellan sprickorna mindre. I matrisen kan nukliderna även utsättas för sorption beskrivet med  $K_d$ -konceptet.

Nuklidspecifika diffusionskoefficienter /Ohlsson och Neretnieks, 1997/ och  $K_d$ -värden /Carbol och Engkvist, 1997/ utnyttjas för FARF31 i SR 97. För sorptionsvärdena har bedömningar om jonexklusion tagits med, medan däremot ytsorption inte har beaktats. De specifika värden som används i SR 97 diskuteras ytterligare i Andersson /1999/.

Som beskrivits ovan erhålls den advektiva komponenten av transporten (dvs transportbana och icke-reaktiv transporttid) från en grundvattenflödes-modell. I kontinuummodellerna erhålls ingen information om den flödesvättan ytan i och med att mediet beskrivs genom konduktivitetens värden snarare än genom en explicit geometri. I kanalnätverksmodellen ingår den flödesvättan ytan i själva modellformuleringen och kan baseras direkt på faktiska borrhålmätningar. I de diskreta sprickmodellerna kan kontaktytan mellan strömmande vatten och berg beräknas. Även om resultatet i detta fall styrs av vilka indata som används på sprickstatistik så erbjuder denna metod ytterligare en möjlighet att verifiera koncept och användande av flödesvätt yta för bruk i säkerhetsanalysen. I hittills utförda säkerhetsanalyser för sprickigt berg har värden inom intervallet 0,01–1 m<sup>2</sup>/(m<sup>3</sup> berg) utnyttjats för den flödesvättan ytan /Elert, 1997/.

I SR 97 används i första hand kontinuum-modellen HYDRASTAR /Norman, 1992/ för beskrivning av grundvattenflöde. I FARF31 används de transportbanor/strömrör som erhålles från HYDRASTAR samt ett spann av värden på flödesvätt yta baserat på skattning av konduktiv sprickfrekvens /Andersson et al, 1998/.

**Klimatförändringar och jordskalv:** Dessa scenariers inverkan på grundvattenflöde och transport är beskrivna i avsnitt 5.5.1. Om ett behov av radionuklidberäkningar föreligger utnyttjas samma transportmodeller som för kapseldefektscenariot men med flödesvägar, flödesvätt yta och övriga relevanta förhållanden representerande det aktuella scenariot.

### **5.8.4 Kolloidtransport**

#### **Allmän beskrivning**

Kolloidbildning beskrivs i avsnitt 5.7.8. Sorberande radionuklider skulle i princip kunna transporteras mer eller mindre ofördröjda med vattnets hastighet om de fastnade på kolloidala partiklar i grundvattnet /Laaksoharju et al, 1995b/. Kolloiderna kan antingen bestå av oorganiska partiklar, t ex kisel, järnhydroxid och lera, eller av organiska partiklar såsom bakterier. Medianhalten av kolloider i grundvattnet är mindre än 0,05 mg/l /Laaksoharju et al, 1995b/. Är upptaget av radionuklider på kolloidala partiklar rever-

sibelt kommer denna process att manifesteras som en sänkning av  $K_d$ -värdet där sänkningen är omvänt proportionell mot koncentrationen av kolloider och sorptionsbenägenheten på kolloiderna. Denna sänkning är dock försumbar givet de aktuella maximala kolloidkoncentrationerna i svenskt berg /Allard et al, 1991/.

Skulle däremot nukliden fastna irreversibelt kan situationen bli en annan. I så fall kommer nukliden att transporteras med partikeln och i sämsta fall inte att fördröjas alls genom sorption och/eller matrisdiffusion i berget. Emellertid visar beräkningar att även för detta fall är konsekvenserna utan betydelse för säkerheten på grund av att den naturliga koncentrationen av kolloider är så låg. Utvärderingen är sammanfattad av Allard et al /1991/.

Beträffande kolloider i djupa grundvatten kan halten kolloider i princip öka i samband med avsmältningen efter en istid. Dock visar studier att de låga halterna kan bestå även i detta fall i och med att den förväntade utspädningen inte resulterar i så låga kalciumkoncentrationer som krävs för att stabila kolloider ska bildas /Laaksoharju et al, 1995b/.

Sammanfattningsvis kan man konstatera att radionuklider i grundvattnet kan förekomma sorberade på kolloider och att det inte helt kan uteslutas att en liten andel binds irreversibelt till mobila naturliga kolloidala partiklar. Den sammantagna konsekvensen av detta för förvarets säkerhet är dock försumbar.

### **Modellstudier/experimentella studier**

Laboratorieförsök bekräftar att radionuklider kan sorbera på kolloider och att sorptionen på dessa mineralkolloider till stor del är reversibel. Styrkan i sorptionen svarar ungefär mot uppmätta  $K_d$  för motsvarande mineral och ämnen /Christiansen-Sätmark, 1995/.

### **Tidsperspektiv**

Samma tidsperspektiv som för den advektiva transporten kan anses relevanta.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Processen sorption på kolloidalt material är behäftad med förhållandevis stor osäkerhet. Dessa osäkerheter gäller dels om processen är reversibel eller inte, dels om vilka faktiska koncentrationer av kolloidalt material som förekommer i grundvattnet. Dock är processens relevans för den övergripande säkerheten av underordnad karaktär i och med att de koncentrationer av kolloidalt material som krävs för att processen ska göra sig gällande aldrig förekommer naturligt i de aktuella grundvattnen. Följaktligen är dessa osäkerheter inte bekymmersamma ur säkerhetsanalysens perspektiv.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

Baserat på ovanstående resonemang har SKB inte funnit anledning att utveckla någon speciell transportmodell för denna mekanism.

## **5.8.5 Speciering**

### **Allmän beskrivning**

Vattnets kemiska miljö (pH, redoxförhållanden etc.) bestämmer vilken speciering (kemisk form) radionukliderna kommer att ha. Specieringen påverkar främst sorptions-egenskaperna som behandlas ovan under Sorption.

## 5.8.6 Transport i gasfas

### **Allmän beskrivning**

Strömning av gas i geosfären beskrivs i avsnitt 4.5.3. Nedan beskrivs hur radionuklider kan transporteras med en gasfas.

Vissa radionuklider som under atmosfärstryck skulle existera i gasform kommer vid rådande tryck vid ett djupförvar att vara lösta i vattenfasen. Dessa nuklider transporteras då som lösta ämnen vars transport beskrivits ovan. Vad som behandlas nedan gäller enbart radionuklider som kan existera i gasfas vid gällande tryck.

Grundvattnet nere på förvarets nivå innehåller lösta gaser, t ex kväve och helium. En gasfas kan bildas om summan av partialtrycken av samtliga ingående ämnen i vattnet överskrider vattentrycket. I denna gasfas ingår de enskilda ämnena motsvarande sina individuella partialtryck och lösligheter. De naturliga halterna av lösta gaser är dock så låga att det inte räcker till för att bilda en gasfas vid det vattentryck som råder på aktuella djup /SKB 91, 1992/.

Högre gashalter skulle kunna uppstå lokalt vid en kapsel om den är så skadad att vatten trängt in till gjutjärnsinsatsen. Vätgas utvecklas vid syrefri korrosion av järn och i ett sådant fall kan man inte utesluta att vattnet blir övermättat på löst gas så att bubblor bildas, dvs summan av partialtrycken överskrider vattentrycket. Eftersom gasbubblor har en lyftkraft strävar de uppåt mot biosfären. Endast radionuklider som kan existera i gasfas kan transporteras direkt med bubblorna. Detta gäller endast ett fåtal nuklider. Gasens innehåll av dessa nuklider styrs av aktuella partialtryck och lösligheter för nukliderna.

Kolloidala partiklar kan också transporteras med gasbubblor /Wan och Wilson, 1994a/. Halten kolloider i djupa grundvatten är låg och saknar betydelse i det här sammanhanget, men experiment visar att även bentonitpartiklar kan följa med gasbubblor /Wan och Wilson, 1994b/. Är detta riktigt innebär det att bentonitpartiklar och även kontaminerade bentonitpartiklar kan följa med gasbubblor. Det finns således en möjlighet till indirekt transport av radionuklider med gasbubblor från en skadad kapsel.

### **Modellstudier/experimentella studier**

För transport av radionuklider med en separat gasfas finns inga egentliga modell- eller experimentella studier genomförda. Detta motiveras främst med hur processen behandlas i säkerhetsanalysen (se nedan).

En modellstudie för att utröna betydelsen av radionuklidtransport med gas och partiklar har genomförts /Neretnieks och Ernstson, 1997/. I studien antogs all gas från en skadad kapsel frigöras i form av små bubblor täckta av montmorillonitpartiklar från bentonitbufferten. Leran antogs vidare ha sorberat radionuklider från utlakningen av bränslet. Partiklarna antogs förbli irreversibelt bundna till bubblorna medan all gas antogs nå markytan. Aktiniderna förblev irreversibelt bundna till lerpartiklarna medan cesium och strontium desorberade från bentonitpartiklarna och utsattes för matrisdiffusion kombinerat med sorption under transporten genom berget. Resultatet av beräkningarna visade att utsläppen till biosfären blev mycket begränsade för samtliga nuklider även med dessa mycket pessimistiska antaganden.

### **Tidsperspektiv**

Transporten av gasbubblor genom geosfären kan vara betydligt snabbare än den advektiva transporten.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Processen för transport av gasformiga nuklider i gasbubblor är välförstådd. Däremot är sorption av kolloider på gasbubblor behäftad med betydande osäkerheter. Dock är denna process av underordnad karaktär för den övergripande säkerheten.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Vid basscenariot förväntas ingen radionuklidtransport. Om analysen av basscenariot ändå skulle resultera i kapselskador, hanteras radionuklidtransport såsom i kapseldefektscenariot nedan.

**Kapseldefektscenario:** I säkerhetsanalysen behandlas transport i gasfas pessimistiskt som en kortslutning av förvaret med biosfären, dvs transporten genom geosfären försummas /SKB, 1995/.

Transport via kolloidalt material som transporteras med gasbubblor beaktas inte i säkerhetsanalysen. Detta baseras på de modellstudier som beskrivits ovan.

Om behov föreligger kan transport i gasfas behandlas på motsvarande sätt för övriga scenarier.

## **5.8.7 Sönderfall**

### **Allmän beskrivning**

Radionukliderna utsätts för sönderfall under transporten genom geosfären. Förhållandet mellan nuklidernas halveringstid och den totala transporttiden (dvs resultatet av både advektiv transport samt matrisdiffusion och sorption) bestämmer hur stor andel av nuklidinnehållet som når biosfären. Sönderfall diskuteras i avsnitt 2.3.1.

### **Sammanfattning av osäkerheter**

Nuklidernas halveringstider är kända med stor säkerhet.

### **Hantering i säkerhetsanalysen**

**Basscenario:** Vid basscenariot förväntas ingen radionuklidtransport. Om analysen av basscenariot ändå skulle resultera i kapselskador, hanteras radionuklidtransport såsom i kapseldefektscenariot nedan.

**Kapseldefektscenario:** Transportkoden FARF31 /Norman och Kjellbert, 1990/ hanterar både kedjesönderfall samt sönderfall för enskilda nuklider.



## 5.9 Referenser

- Ageskog L, Jansson P, 1998.** Prototype repository. Finite element analyses of heat transfer and temperature distribution in buffer and rock. SKB PR HRL-98-20, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Ahlbom K, Tirén S, 1991.** Overview of geologic and geohydrologic conditions at the Finnsjön site and its surroundings. SKB TR 91-08, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Ahlbom K, Andersson J-E, Andersson P, Ittner T, Ljunggren C, Tirén S, 1992.** Finnsjön Study Site. Scope of activities and main results, SKB TR 91-08, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Alexander R (ed), 1992.** A natural analogue study of the Maqarin hyperalkaline groundwaters. NAGRA Technical Report 91-10.
- Allard B, Karlsson F, Neretnieks I, 1991.** Concentrations of particulate matter and humic substances in deep groundwaters and estimated effects on the adsorption and transport of radionuclides. SKB TR 91-50, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Almén K-E, Stanfors R, Svemar C, 1996.** Nomenklatur och klassificering av geologiska strukturer vid platsundersökningar för SKB's djupförvar. SKB PR D-96-29, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Andersson J, Hermansson J, Elert M, Gylling B, Moreno L, Selroos J-O, 1998.** Derivation and treatment of the flow wetted surface and other geosphere parameters in the transport models FARF31 and COMP32 for use in safety assessment. SKB R-98-60, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Andersson J, 1999.** SR 97 – Data and data uncertainties. Compilation of data and evaluation of data uncertainties for radionuclide transport calculations. SKB TR-99-09, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Autio J, 1997.** Characterization of the excavation disturbance caused by boring of the experimental full scale deposition holes in the research tunnel at Olkiluoto. SKB TR 97-24, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Banwart S (ed), 1995.** The Äspö redox investigations in block scale. Project summary and implications for repository performance assessment. SKB TR 95-26, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Banwart S (ed), Laaksoharju M, Skårman C, Gustafsson E, Pitkänen P, Snellman M, Landström O, Aggeryd I, Mathiasson L, Sundblad B, Tullborg E-L, Wallin B, Pettersson C, Pedersen K, Arlinger J, Jahromi N, Ekendahl S, Hallbeck L, Degueldre C, Malmström M, 1995.** The Redox experiment in block scale. Final reporting of results from the Three Year Project. SKB PR 25-95-06, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Barton N, Bandis S, Bakhtar K, 1985.** Strength, deformation and conductivity coupling of rock joints. IJRM, Vol 22, No 3, pp 121–140.
- Barton N, Vik G, 1988.** Stage I joint characterization and stage II preliminary prediction using small Core Samples. Stripa Project IR 88-08, Svensk Kärnbränslehantering AB.

- Birgersson L, Neretnieks I, 1988.** Diffusion in the Matrix of Granitic Rock. Field Test in the Stripa Mine. Final Report, SKB TR 88-08, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Boulton G S, Wallroth T, Kautsky U, Morén L, 1999.** Impact of long-term climate change on a deep geological repository for spent nuclear fuel. SKB TR-99-05, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Brady B, Brown E T, 1993.** Rock mechanics for underground mining. Second edition, Chapman & Hall, London.
- Bruno J, Duro L, Jordana S, Cera E, 1996.** Revisiting Poços de Caldas. Application of the co-precipitation approach to establish realistic solubility limits for performance assessment. SKB TR 96-04, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Bruno J, Duro L, 1997.** Discussion of data uncertainties, Review of selected sorption data of radionuclides in granitic rock, SKB PR U-98-06, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Bäckblom G (ed), Stanfors R (ed), 1989.** Interdisciplinary study of post-glacial faulting in the Lansjärv area Northern Sweden. SKB TR 89-31, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Cacas M C, Ledoux E, de Marsily G, Tillie B, Barbereau A, Durand E, Fuega B, Peaudecerf P, 1990.** Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network: Calibration and validation, 1. The flow model, *Water Resour. Res.* 26(3), 479–489.
- Carbol P, Engkvist I, 1995.** Sorption och sorptionsmodeller. Tillämpningar och begränsningar i säkerhetsanalys. SKB AR 95-26, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Carbol P, Engkvist I, 1997.** Compilation of radionuclide sorption coefficients for performance assessment. SKB R-97-13, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Case J B, Kelsall P C, 1987.** Modification of Rock Mass Permeability in the Zone surrounding a shaft in Welded Tuff. Nevada Nuclear Waste Storage Investigation Project, Contractor Report SAND86, 7001, Albuquerque, Nevada, USA.
- Chapelle F, Lovley D, 1992.** Competitive exclusion of sulphate reduction by Fe(III) reducing bacteria. *Ground Water*, vol 30, 29–36.
- Chapman N A, Mc Kinley I G, Shea M E, Smellie J A T (editors), 1993.** The Poços de Caldas project: Natural analogues of processes in a radioactive waste repository. Elsevier, Amsterdam, p 234.
- Christiansen-Sätmark B, 1995.** Transport of radionuclides and colloid through quartz sand columns. Doctoral thesis, Dept of Nuclear Chemistry, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden.
- Claesson J, 1992.** Bouyancy flow in fractured rock with a salt gradient in the groundwater – An initial study. SKB TR 92-05, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Claesson J, Probert T, 1996.** Temperature field due to time dependent heat sources in a large rectangular grid – Derivation of analytical solution. SKB TR 96-12, Svensk Kärnbränslehantering AB.

- Dershowitz W G, Lee J, Geier J, Foxford T, La Pointe P, Thomas A, 1995.** FracMan User manual, Golder Associates Inc. Seattle.
- Earlougher R C, 1977.** Advances in well test analysis. SPE monograph Volume 5 of Henry L. Doherty Series.
- Elert M, Neretnieks I, Kjellbert N, Ström A, 1992.** Description of the transport mechanisms and pathways in the far field of a KBS-3 type repository, SKB TR 92-09, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Elert M, 1997.** Retention mechanisms and the flow wetted surface – implications for safety analysis. SKB TR 97-01, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Elert M, 1999.** Evaluation of modelling of the TRUE-1 radially converging and dipole test with conservative tracers. The Äspö Task Force on Modelling of Groundwater Flow and Transport of Solutes. Task 4C and 4D. SKB TR-99-04, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Eloranta P, Simonen A, Johansson E, 1992.** Creep in crystalline rock with application to high level nuclear waste repository. Report YJT-92-10. Nuclear Waste Commission of Finnish Power Companies, Helsingfors.
- Emsley S, Olsson O, Stenberg L, Alheid H-J, Falls S, 1997.** Zedex – A study of damage and disturbance from tunnel excavation by blasting and tunnel boring. SKB TR 97-30, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Fairhurst C, Gera F, Gnirk P, Gray M, Stillborg B, 1993.** OECD/NEA International Stripa Project. Overview volume I. Executive summary. Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Finstlerle S, Pruess K, 1995.** Solving the estimation-identification problem in two-phase flow modelling. Water Resour. Res., 31, 913–924.
- Follin S, 1992.** Numerical calculations on heterogeneity of groundwater flow. SKB TR 92-14, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Follin S, 1995.** Geohydrological simulation of a deep coastal repository. SKB TR 95-33, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Follin S, Hermanson J, 1997.** A Discrete Fracture Network Model of the Äspö TBM Tunnel Rock Mass. SKB AR D-97-001, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Frape S K, Fritz P, 1987.** Geochemical trends for groundwaters from the Canadian shield. In: Fritz P and Frape S K, Saline water and gases in crystalline rocks. Geol. Assoc. of Canada Spec. Pap., 33:19–38.
- Frick U, Alexander W R, Baeyens B, Bossart P, Bradbury M H, Bühler Ch, Eikenberg J, Fierz Th, Heer W, Hoehn E, McKinley I G, Smith P A, 1992.** Grimsel Test Site. The radionuclide migration experiment – Overview of investigations 1985–1990, PSI-Bericht Nr. 120 NAGRA NTB 91-04, Switzerland.
- Gascoyne M, Davison C C, Ross J D, Pearson R, 1987.** Saline groundwaters and brines in plutons in the Canadian shield. In: Fritz P and Frape S K. Saline water and gases in crystalline rocks. Geol. Assoc. of Canada Spec. Pap., 33.

**Gnirk P, 1993.** OECD/NEA International Stripa Project. Overview volume II. Natural barriers. Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Gray M, 1993.** OECD/NEA International Stripa Project. Overview volume III. Engineered barriers. Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Grenthe I, Stumm W, Laaksoharju M, Nilsson A-C, Wikberg P, 1992.** Redox potentials and redox reactions in deep groundwater systems. *Chemical Geology*, vol. 98 (1992), pp 131–150.

**Grenthe I, Puigdomenech I (ed), 1997.** Bruno J: Trace element modelling. In: *Modelling in aquatic chemistry*, p 573, OECD/NEA, Paris.

**Griffith A A, 1924.** Theory of rupture. Proc. 1st Int. Congr. Appl. Mech., Delft.

**Guimera J, Duro L, Jordana S, Bruno J, 1999.** Effects of ice melting and redox front migration in fractured rocks of low permeability, SKB TR-99-19, Svensk Kärnbränslehantering AB (under utarbetande).

**Gurban I, Laaksoharju M, Ledoux E, Madé B, Salignac AL, 1998.** Indication of uranium transport around the reactor zone at Bagombe. SKB TR-98-06, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Gustafson G, Ström A, 1995.** The Äspö Task Force on modelling of groundwater flow and transport of solutes. Evaluation report on Task No 1, the LPT2 large scale field experiments. SKB ICR 95-05, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Gylling B, 1997.** Development and applications of the channel network model for simulations of flow and solute transport in fractured rock. Doctoral Thesis, Dep. of Chemical Eng. and Tech. TRITA-KET R72, Royal Institute of Technology, Stockholm.

**Hakami E, 1995.** Aperture distribution of rock fractures. Doctoral Thesis. Div. of Engineering Geology, Department of Civil and Environmental Engineering, Royal Institute of Technology, Stockholm.

**Hakami E, Olofsson S-O, Hakami H, Israelsson J, 1998.** Global thermomechanical effects from a KBS-3 type repository. Summary Report. SKB TR-98-01, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Hansson H, Stephansson O, Shen Baotang, 1995.** SITE-94. Far-field Rock Mechanics Modelling for Nuclear Waste Disposal. SKI Report 95:4, Statens kärnkraftinspektion, Stockholm.

**Hermansson H-P, Sjöblom R, Åkerblom G, 1991a.** Geogas in Crystalline Bedrock. SKN (National Board for Spent Nuclear Fuel) Report 52.

**Hermansson H-P, Åkerblom G, Chyssler J, Lindén A, 1991b.** Geogastransport i berg, förstudie. SKN (National Board for Spent Nuclear Fuel) Rapport 43, Stockholm.

**Hökmark H, 1990.** Distinct element method modeling of fracture behavior in near-field rock. Stripa Project TR 91-01, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Hökmark H, Israelsson J, 1991.** Distinct element modelling of joint behavior in nearfield rock. Stripa Project TR 91-22, Svensk Kärnbränslehantering AB.

- Hökmark H, 1996.** Canister Positioning. Stage 1 Thermomechanical Nearfield Rock Analysis. SKB AR D-96-014, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Israelsson J, 1995.** Global Thermo-Mechanical Effects from a KBS-3 Type Repository. Phase 1: Elastic analyses. SKB PR D-95-008, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Israelsson J, 1996.** Global Thermo-Mechanical Effects from a KBS-3 Type Repository. Phase 2: Three dimensional modelling with major fracture zones – base. SKB PR D-96-006, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Jaimson B, Cook N G, 1978.** An analysis of measured values for the state of stress in the Earth's crust. Report LBL-7071, SAC-07, Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley, California.
- Jarsjö J, 1998.** Hydraulic conductivity relations in soil and fractured rock: Fluid component and phase interaction effects. Doctoral Thesis, Dep. of Civil and Environmental Eng. TRITA-AMI PHD 1019, Royal Institute of Technology, Stockholm.
- Johansson E, Hakala M, Lorig L, 1991.** Rock mechanical, thermomechanical and hydraulic behaviour of the near field for spent nuclear fuel. Report YJT-91-21. Nuclear Waste Commission of Finnish Power Companies, Helsingfors.
- Johansson E, Hakala M, 1995.** Rock mechanical aspects on the critical depth for a KBS-3 type repository based on brittle rock strength criterion developed at URL in Canada. SKB AR D-95-014, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Kijko A, Skorda E, Wahlström R, Mäntyniemi P, 1993.** Maximum likelihood estimation of seismic hazard for Sweden. *Natural Hazards*, Vol. 7, 41–57.
- Kim J I, Delakowitz B, Zeh P, Probst T, Lin X, Ehrlicher U, Schauer C, Ivanovich M, Longworth G, Hasler S E, Gardiner M, Fritz P, Klotz D, Lazik D, Wolf M, Geyer S, Alexander J L, Read D, Thomas J B, 1996.** Colloid migration in groundwaters: geochemical interactions of radionuclides with natural colloids. EUR 16754 EN.
- Knutsson G, Morfeldt C-G, 1995.** Grundvatten. Teori & tillämpning, Svensk Byggtjänst, Stockholm.
- Kotelnikova S, Pedersen K, 1998.** Microbial oxygen consumption in Äspö tunnel environments. SKB PR HRL-98-11, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Kukkonen I, Lindberg A, 1995.** Thermal conductivity of rocks at the TVO investigation sites Olkiluoto, Romuvaara and Kivetty. Report YJT-95-08, Nuclear Waste Commission of Finnish Power Companies, Helsingfors.
- La Pointe P, Wallmann P, Thomas A, Follin S, 1997.** A methodology to estimate earthquake effects on fractures intersecting canister holes. SKB TR 97-07, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- La Pointe P, Cladouhos T, Follin S, 1998.** Calculation of displacements on fractures intersecting canisters induced by earthquakes: Aberg, Beberg and Ceberg Examples (under utarbetande).

- Laaksoharju M, Vuorinen U, Snellman M, Allard B, Pettersson C, Helenius J, Hinkkanen H, 1993.** Colloids or artefacts? A TVO/SKB co-operation project in Olkiluota, Finland. SKB TR 93-32, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Laaksoharju M (ed), 1995.** Sulphate reduction in the Äspö HRL tunnel. SKB TR 95-25, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Laaksoharju M, Degueldre C, Skårman C, 1995a.** Studies of colloids and their importance for repository performance assessment. SKB TR 95-24, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Laaksoharju M, Skårman C, 1995.** Groundwater sampling and chemical characterization of the Äspö HRL tunnel in Sweden. SKB PR 25-95-29, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Laaksoharju M, Smellie J, Nilsson A-C, Skårman C, 1995b.** Groundwater sampling and chemical characterization of the Laxemar deep borehole KLX02. SKB TR 95-05, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Laaksoharju M, Wallin B, 1997.** Evolution of the groundwater chemistry at the Äspö Hard Rock Laboratory. Proceedings of the second Äspö International Geochemistry Workshop, June 6-7, 1995. SKB ICR 97-04, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Laaksoharju M, Gurban I, Skårman C, 1998.** Summary of hydrochemical conditions at Aberg, Beberg and Ceberg. Intera KB, Sollentuna.
- Laaksoharju M, Gurban I, Andersson C, 1999.** Indications of the origin and evolution of the groundwater at Palmottu. The EU Palmottu natural analogue project. SKB TR 99-xx, Svensk Kärnbränslehantering AB (under tryckning).
- Landström O, Tullborg E-L, 1990.** The influence of fracture mineral/groundwater interaction on the mobility of U, Th, REE and other trace elements, SKB TR 90-37, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Landström O, Tullborg E-L, 1995.** Interactions of trace elements with fracture filling minerals from the Äspö Hard Rock Laboratory. SKB TR 95-13, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Larsson A, Pers K, Skagius K, Dverstorp B (eds) 1997.** The International INTRAVAL Project. Phase 2, Summary report. OECD/NEA – SKI.
- Lau J O S, Jackson R, Gorski B, 1991.** The effects of temperature and pressure on the mechanical properties of Lac du Bonnet grey granite. In Roegiers (ed): Rock Mechanics as a Multidisciplinary Science, Balkema, Rotterdam.
- Leijon B, 1993.** Mechanical properties of fracture zones. SKB TR 93-19, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Leijon B, 1995.** Summary of rock stress data from Äspö. SKB PR 25-95-15, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Li C, 1993.** Deformation and failure of brittle rocks under compression. PhD Thesis, Division of Rock Mechanics, Luleå University of Technology, Luleå.

- Long J C S, Gilmour P, Witherspoon P A, 1985.** A model for steady state flow in random three-dimensional networks of disc-shaped fracture. *Water Resour. Res.* 21(8), 1105–1115.
- Löfman J, Taivassalo V, 1995.** Simulations of pressure and salinity fields at Äspö. SKB ICR 95-01, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Malmström M, Banwart S, Duro L, Wersin P, Bruno J, 1995.** Biotite and chlorite weathering at 25 °C. SKB TR 95-01, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- de Marsily G, 1986.** Quantitative hydrogeology. Groundwater hydrology for engineers, Academic Press, Inc., New York.
- Martin D, 1994.** TVO & SKB Workshop on Brittle Rock Strength. SKB AR 94-59, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Martino J B, Read R S, 1995.** Mine-By Experiment Phase III – Heated Failure Tests. Technical Progress Report and Summary of Stage 3. AECL, Whiteshell Laboratories, Pinnawa, Manitoba.
- Miller W, Alexander R, Chapman N, McKinley I, Smellie J, 1994.** Natural analogue studies in the geological disposal of radioactive wastes, Elsevier, Amsterdam.
- Milnes A G, Gee D G, 1992.** Bedrock stability in southeastern Sweden. Evidence from fracturing in the ordovician limestones of northern Öland. SKB TR 92-23, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Morén L, Ritchey T, Stenström M, 1998.** Scenarier baserade på mänskliga handlingar. SKB R-98-54, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Moreno L, Gylling B, Neretnieks I, 1995.** Solute transport in fractured media. The important mechanisms for performance assessment. SKB TR 95-11, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Muir-Wood R, 1993.** A review of the seismotectonics of Sweden. SKB Technical Report TR 93-13, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm.
- Muir-Wood R, 1995.** Reconstructing the tectonic history of Fennoscandia from its margins: The past 100 million years. SKB TR 95-36, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- National Research Council, 1996.** Rock fractures and fluid flow. Contemporary understanding and applications. National Academy Press, Washington, D.C.
- Neretnieks I, 1980.** Diffusion in the rock matrix: An important factor in radionuclide retardation?, *J. Geophysical Research*, vol. 85, no. B8, pp 4379–4397.
- Neretnieks I, Ernstson M-L, 1997.** A note on radionuclide transport by gas bubbles, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, vol. 465, pp 855–862.
- Nordqvist A W, 1995.** Discrete modeling of solute transport in rocks with variable aperture fractures. Doctoral Thesis, Dep. of Civil and Environmental Eng. TRITA-AMI PHD 1004, Royal Institute of Technology, Stockholm.



- Nordstrom D K, McNutt R H, Puigdomènech I, Smellie J A T, Wolf M, 1992.** Ground water chemistry and geochemical modeling of water-rock interactions at the Osamu Utsumi mine and the Morro do Ferro analogue study sites, Poços de Caldas, Minas Gerais, Brazil. *Journal of Geochemical Exploration*, 45 (1992) 249–287, Elsevier Science Publishers B V, Amsterdam.
- Norman S, Kjellbert N, 1990.** FARF31 – A far field radionuclide migration code for use with the PROPER package, SKB TR 90-01, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Norman S, 1992.** HYDRASTAR – a code for stochastic simulation of groundwater flow, SKB TR 92-12, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Ohlsson Y, Neretnieks I, 1997.** Diffusion data in granite, Recommended values, SKB TR 97-20, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Olin M, Lehtikoinen J, 1997.** Application of surface complexation modelling: Nickel sorption on quartz, manganese oxide, kaolinite and goethite, and thorium on silica, POSIVA 97-10, Helsinki.
- Olsson O (ed), 1992:** Site characterization and validation – Final report. SKB TR 92-22, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Olsson O, 1994.** Test plan for degassing of groundwater and two phase flow. Release 1.0. SKB PR 25-94-34, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Olsson O, Neretnieks I, Cvetkovic V, 1994.** Deliberations on radionuclide transport and rationale for tracer transport experiments to be performed at Äspö. A selection of papers, SKB PR 25-95-01, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Olsson O, Gale J E, 1995.** Site assessment and characterization for high-level nuclear waste disposal: results from the Stripa Project, Sweden, *Quarterly Journal of Engineering Geology*, vol. 28, suppl. 1, pp S17–S30.
- Olsson O, Emsley S, Bauer C, Falls S, Stenberg L, 1996.** ZEDEX – a study of the zones of disturbance for blasted and bored tunnels. SKB ICR 96-03, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Olsson O, Winberg A, 1996.** Current understanding of extent and properties of the excavation disturbed zone and its dependence of excavation method. In: J B Martino and C D Martin (eds): *Proceedings of the Excavation Disturbed Zone Workshop*. Canadian Nuclear Society, Toronto, Ontario, Canada.
- Olsson R, 1998.** Mechanical and hydromechanical behavior of hard rock joints. PhD Thesis, Chalmers University of Technology, Göteborg.
- Pedersen K, Karlsson F, 1995.** Investigation of subterranean micro-organisms. Their importance for performance assessment of radio-active waste disposal. SKB TR 95-10, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Pedersen K, 1997.** Investigations of subterranean microorganisms and their importance for performance assessment of radioactive waste disposal. Results and conclusions achieved during the period 1995 to 1997. SKB TR 97-22, Svensk Kärnbränslehantering AB.

- Pirhonen V, Pitkänen P, 1991.** Redox capacity of crystalline rocks. Laboratory studies under 100 bar oxygen gas pressure. SKB TR 91-55, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Pitkänen P, Lukkonen A, Ruotsalainen P, Leino-Forsman H, Vuorinen U, 1998.** Geochemical modelling of groundwater evolution and residence time at Olkiluoto site. Helsinki, Finland: Report POSIVA 98- (to be published).
- Plummer L N, Prestemon E C, Parkhurst D L, 1991.** An interactive code (NETPATH) for modelling NET geochemical reactions along a flow path. US Geological Survey, Water-Resources Investigation Report 91-4078.
- Pollard D D, Segall P, 1987.** Theoretical displacements and stresses near fractures in rock: with applications to faults, joints, veins, dikes, and solution surfaces. Fracture Mechanics of Rock, Academic Press Inc. Ltd., London.
- Probert T, Claesson J, 1997.** Thermoelastic stress due to a rectangular heat source in a semi-infinite medium. Application for the KBS-3 Repository. SKB TR 97-26, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Probert T, 1998.** The underground as a storage facility. Modelling of Nuclear Waste Repositories and Aquifer Thermal Energy Stores. Doctoral Thesis, Lund-MPh-98/02, Department of Mathematical Physics. Lund Institute of Technology, Lund.
- Puigdomenech I, Banwart S A, Bateman K, Milodowski A E, West J M, Griffault L, Gustafsson E, Hama K, Yoshida H, Kotelnikova S, Pedersen K, Lartigue J-E, Michaud V, Trotignon L, Morosini M, Rivas Perez J, Tullborg E-L, 1998.** Redox experiment in detailed scale (REX). First project status report. SKB-ICR-99-01-SE, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Pusch R, 1996.** JADE, Jämförelse av bergmekaniska funktionssätt hos KBS3-V, KBS3-H och MLH. Underlagsrapport för konceptjämförelse. Clay Technology AB, Lund.
- Pusch R, Hökmark H, 1993.** Mechanisms and consequences of creep in the nearfield rock of a KBS-3 repository. SKB TR 93-10, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Rasilainen K, 1997.** Matrix diffusion model. In situ tests using natural analogues, VTT Publications 331, Technical Research Centre of Finland, Espoo.
- Rehbinder G, Yakubenko P A, 1998.** Displacements and flexural stresses of a loaded elastic plate on a viscous liquid. SKB PR U-98-04, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Rhén I, Svensson U, Andersson J-E, Andersson P, Eriksson C-O, Gustafsson E, Ittner T, Nordqvist R, 1992.** Äspö Hard Rock Laboratory. Evaluation of the combined longterm pumping and tracer test (LPT2) in borehole KAS06. SKB TR 92-32, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Rhén I (ed), Gustafsson G, Stanfors R, Wikberg P, 1997.** Äspö HRL – Geoscientific evaluation 1997/5. Models based on site characterization 1986–1995. SKB TR 97-06, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Rosengren L, Stephansson O, 1990.** Distinct element modelling of the rock mass response to glaciation at Finnsjön, central Sweden. SKB TR 90-40, Svensk Kärnbränslehantering AB.

- Rummel F, 1997.** Determination of rock mechanics parameters of the granite at the Äspö Hard Rock Laboratory, Sweden. Äspö Hard Rock Laboratory Technical Note TN-97-13z, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Scholz C H, 1990.** The mechanics of earthquakes and faulting. Cambridge University Press, Cambridge.
- Shen B, Stephansson O, 1990a.** Modelling of rock mass response to repository excavations, thermal loading from radioactive waste and swelling pressure of buffer material. SKI Technical Report 90:12, Statens kärnkraftinspektion, Stockholm.
- Shen B, Stephansson O, 1990b.** 3DEC mechanical and thermomechanical analysis of glaciation and thermal loading of a waste repository. SKI Technical Report 90:3, Statens kärnkraftinspektion, Stockholm.
- Shen B, Stephansson O, 1996a.** SITE-94. Modelling of rock fracture propagation for nuclear waste disposal. SKI Report 96:18, Statens kärnkraftinspektion, Stockholm.
- Shen B, Stephansson O, 1996b.** SITE-94. Near-field rock mechanical modelling for nuclear waste disposal. SKI Report 96:17, Statens kärnkraftinspektion, Stockholm.
- Sherwood Lollar B, Frapé S K, Fritz P, Macko S A, Welhan J A, Blomqvist R, Lahermo P W, 1993.** Evidence for bacterially generated hydrocarbon gas in Canadian shield and Fennoscandian shield rocks. *Geochimica et Cosmochimica Acta* (57) 5073–5085.
- Skagius K, Neretnieks I, 1985.** Porosities and diffusivities of some non-sorbing species in crystalline rocks, SKB TR 85-03, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Skagius K, 1986.** Diffusion of dissolved species in the matrix of some Swedish crystalline rocks, PhD Thesis. Department of Chemical Engineering, Royal Institute of Technology, Stockholm.
- SKB 91, 1992.** Final disposal of spent nuclear fuel. Importance of the bedrock for safety. SKB TR 92-20, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- SKB, 1995. R&D-Programme 95. Parts I–II.** Treatment and final disposal of nuclear waste. Programme for encapsulation, deep geological disposal and research, development and demonstration.
- SKB, 1995, SR 95.** Mall för säkerhetsrapporter med beskrivande exempel. Svensk Kärnbränslehantering AB
- Smellie J, Larsson N-Å, Wikberg P, Carlsson L, 1985.** Hydrochemical investigations in crystalline bedrock in relation to existing hydraulic conditions: Experiences from the SKB test sites in Sweden. SKB TR 85-11, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Smellie J A T, Laaksoharju M, 1992.** The Äspö Hard Rock Laboratory. Final evaluation of the hydrogeochemical pre-investigations in relation to existing geologic and hydraulic conditions. SKB TR 92-31, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Smellie J (ed), 1998.** Maqarin natural analogue study: Phase III. SKB TR-98-04, Svensk Kärnbränslehantering AB.

- Stanfors R, Ericsson L O, 1993.** Post-glacial faulting in the Lansjärv area, northern Sweden. Comments from the expert group on a field visit at the Molberget post-glacial fault area. SKB TR 93-11, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Stephansson O, Jing L, Tsang C F (eds), 1996.** Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Processes of Fractured Media Developments in Geotechnical Engineering, Vol 79, Elsevier Science B. V., Amsterdam.
- Stille H, Olsson P, 1996.** Summary of rock mechanical results from the construction of Äspö Hard Rock Laboratory. SKB PR HRL 96-07, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Stumm W, Morgan J, 1981.** Aquatic Chemistry, 2nd ed Wiley Interscience Publishers.
- Sundberg J, 1995.** Termiska egenskaper för kristallint berg i Sverige. Kartor över värmekonduktivitet, värmefflöde och temperatur på 500 m djup. SKB PR D-95-018, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Sundberg J, Gabrielsson A, 1998.** Field measurements of thermal properties of the rocks in the prototype repository at Äspö HRL. SKB PR HRL-98-28, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Svensson U, 1997a.** A regional analysis of groundwater flow and salinity distribution in the Äspö area. SKB TR 97-09, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Svensson U, 1997b.** A site scale analysis of groundwater flow and salinity distribution in the Äspö area. SKB TR 97-17, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Svensson, U, 1999.** Subglacial groundwater flow at Äspö as governed by basal melting and ice tunnels. SKB R-99-38, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Swan G, 1978.** The mechanical properties of Stripa granite. Swedish american program on radioactive waste in mined caverns in crystalline rock. Report SAC- 03, Lawrence Berkeley Laboratories, Berkeley, California.
- Thunvik R, Braester C, 1980.** Hydrothermal conditions around a radioactive waste repository, SKBF/KBS TR 80-19, Svensk Kärnbränsleförsörjning.
- Thunvik R, Braester C, 1991.** Heat propagation from a radioactive waste repository. SKB TR 91-61, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Toulhoat P, Beaucaire C, Michard G, Ouzounian G, 1992.** Chemical evolution of deep groundwater in granites, Information acquired from natural systems. Paleohydrogeological methods and their applications. Proceedings from an NEA workshop 9–10 November 1992.
- Tullborg E-L, Wallin B, Landström O, 1991.** Hydrogeochemical studies of fracture minerals from water conducting fractures and deep groundwaters at Äspö. SKB PR 25-90-01, Svensk Kärnbränslehantering AB.
- Turcotte D L, 1992.** Fractals and chaos in geology and geophysics. Cambridge University Press, Great Britain.
- Voss C I, Andersson J, 1993.** Regional flow in the Baltic shield during Holocene coastal regression. Groundwater, Vol. 31, No. 6, p 989–1006.

**Wallin B, 1995.** Paleohydrological implications in the Baltic area and its relation to the groundwater at Äspö, south-eastern Sweden – A literature study. SKB TR 95-06, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Wan J, Wilson J L, 1994a.** Colloid transport in unsaturated porous media. *Water Resources Research*, vol. 30, no. 4, pp 854–864.

**Wan J, Wilson J L, 1994b.** Visualization of the role of gas-water interface on the fate and transport of colloids in porous media. *Water Resources Research*, vol. 30, no. 1, pp 11–23.

**Wannäs K, Flodén T, 1994.** Tectonic framework of the Hanö Bay area, southern Baltic Sea. SKB TR 94-09, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Wersin P, Bruno J, Laaksoharju M, 1994.** The implication of soil acidification on a future HLW repository. SKB TR 94-31, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Wikberg P, Axelsen K, Fredlund F, 1987** Deep groundwater in crystalline rock. SKB TR 87-07, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Wikberg P (ed), Gustafson G, Rhén I, Stanfors R, 1991.** Äspö Hard Rock Laboratory. Evaluation and conceptual modelling based on the pre-investigations. SKB TR 91-22, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Wikramaratna R S, Goodfield M, Rodwell W R, Nash P J, Agg P J, 1993.** A preliminary assessment of gas migration from the Copper/Steel Canister. SKB TR 93-31, Svensk Kärnbränslehantering AB.

**Winberg A (ed), Andersson P, Hermansson J, Byegård J, Cvetkovic V, 1999.** Final report of the First stage of the Tracer Retention Understanding Experiments. SKB TR-99-xx, Svensk Kärnbränslehantering AB (under utarbetande).