

Veröffentlichung in Geowissenschaftliche Mitteilungen 27 (März 2007): 21-22

THEREDA – Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis gestartet

Um die Sicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle sowie von Untertagedeponien für chemisch-toxische Stoffe und die Sanierung von Altlasten des Uranbergbaus zu gewährleisten, ist es von entscheidender Bedeutung die Migration von toxischen Bestandteilen in die Biosphäre belastbar voraussagen zu können. Hierfür ist ein vertieftes Verständnis der physikalisch-chemischen Eigenschaften der mobilisierten Schadstoffe selbst wie auch ihrer Wechselwirkungen im System Abfall, Nahfeld, Geosphäre und Biosphäre erforderlich.

Eine modellhafte Abbildung der Mobilisierungs-, Ausbreitungs- und Rückhalteprozesse erfolgt in Rechencodes. Die eingesetzte Methodik für die Behandlung der Einzelprozesse umfasst Speziations- und Löslichkeitsberechnungen unter Verwendung thermodynamischer Daten. Letztere sind jedoch in ihrer Anwendbarkeit derzeit erheblich eingeschränkt. Gründe dafür sind u.a. mangelnde Vollständigkeit, Inkonsistenzen und begrenzte Variationsbereiche von intensiven Größen wie Temperatur oder Druck. Hinzu kommt die Schwierigkeit, die Unsicherheit von Modellierungsergebnissen einzuschätzen, da die Unsicherheit der zugrunde liegenden thermodynamischen Daten häufig nicht dokumentiert ist. Gutachterliche Aussagen sind unter solchen Umständen angreifbar.

Die mit geochemischen Modellrechnungen zu Langzeitsicherheitsanalysen für die Endlagerung von nuklearen Abfällen in Deutschland befassten Institutionen haben die Notwendigkeit einer einheitlichen, konsistenten und qualitätsgesicherten thermodynamischen Referenzdatenbasis seit längerem erkannt. Gemeinsam wurde im Rahmen des „Arbeitskreis Thermodynamische Referenzdatenbasis“ eine Vorgehensweise zur Verwirklichung einer solchen Datenbasis entwickelt, welche die spezifischen Rahmenbedingungen in Deutschland berücksichtigt. Aufgrund des gemeinsamen Interesses an der Endlagerproblematik orientieren sich die Überlegungen weitgehend an den entsprechenden Aspekten, sind aber ohne weiteres auch auf andere geochemische Probleme, wie z.B. die Altlastensanierung übertragbar.

Seit Juli 2006 läuft hierzu nun das mit vorerst 3-jähriger Laufzeit von BMBF, BMWi und BMU geförderte Projekt „THEREDA“ (Thermodynamische Referenzdatenbasis). Das Projekt zielt darauf ab, Langzeitsicherheitsanalysen mittel- bis langfristig besser, zuverlässiger, vergleichbarer, belastbarer und nachvollziehbarer zu machen. Die bereits vorhandene Kompetenz aus den Bereichen Endlagerforschung, Untertagedeponierung und

Altlastensanierung soll zusammengeführt und langfristig gesichert werden. Internationale Erfahrungen werden berücksichtigt. Durch umfassende Dokumentation von Basisdaten und Auswertelgorithmen werden Fehlerabschätzungen und -fortpflanzungen möglich. Diese sind unverzichtbar für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen. Die Pflege und Erweiterung der Datenbasis durch einen Kreis von Experten auch über den Zeitraum ihrer Erstellung hinaus werden vorbereitet und erleichtert.

Die Arbeiten werden gemeinsam von den Mitglieder des „Arbeitskreis Thermodynamische Referenzdatenbasis“ durchgeführt. Zum diesem Arbeitskreis gehören die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), das Institut für Nukleare Entsorgung (INE) des FZ Karlsruhe, das Institut für Radiochemie (IRC) des FZ Dresden-Rossendorf, das Institut für Anorganische Chemie der TU Bergakademie Freiberg, die Colenco Power Engineering AG und das Europäische Institut für Transuranelemente (ITU).

Parallel zum Aufbau der Datenbasis wird eine Homepage (www.thereda.de) erstellt. Dieses Portal soll sowohl potentiellen Nutzern den Zugang zur Datenbasis ermöglichen, als auch als Informations- und Diskussionsplattform zur Datenbasis dienen. Da Datenbasis und Homepage noch im Aufbau befindlich sind, werden Kommentare und Anregungen ausdrücklich erbeten. Insbesondere ist in der Anfangsphase die Nutzeranforderungen wie z.B. Funktionalität der Abfragen, Informationsgehalt von Abfrageergebnissen oder Kompatibilität mit Rechencodes von Interesse.

Stefan Wilhelm, Baden/Schweiz