

---

# Verbundprojekt THEREDA

## Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis



Forschungszentrum Karlsruhe  
in der Helmholtz-Gemeinschaft



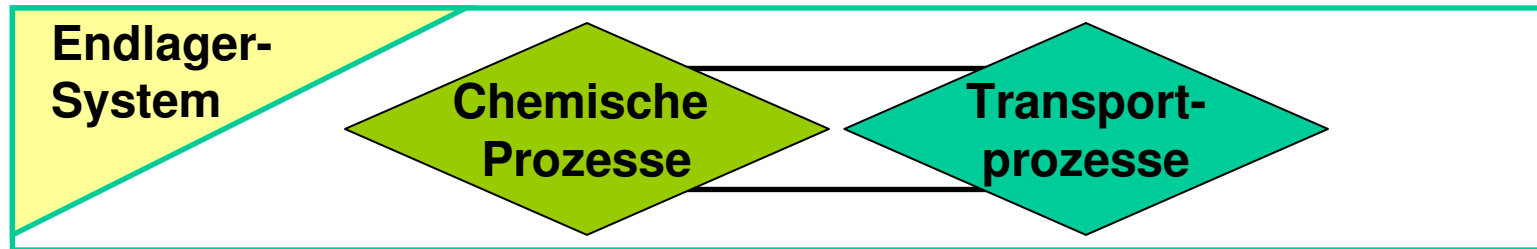
Sven Hagemann, Helge C. Moog

GRS

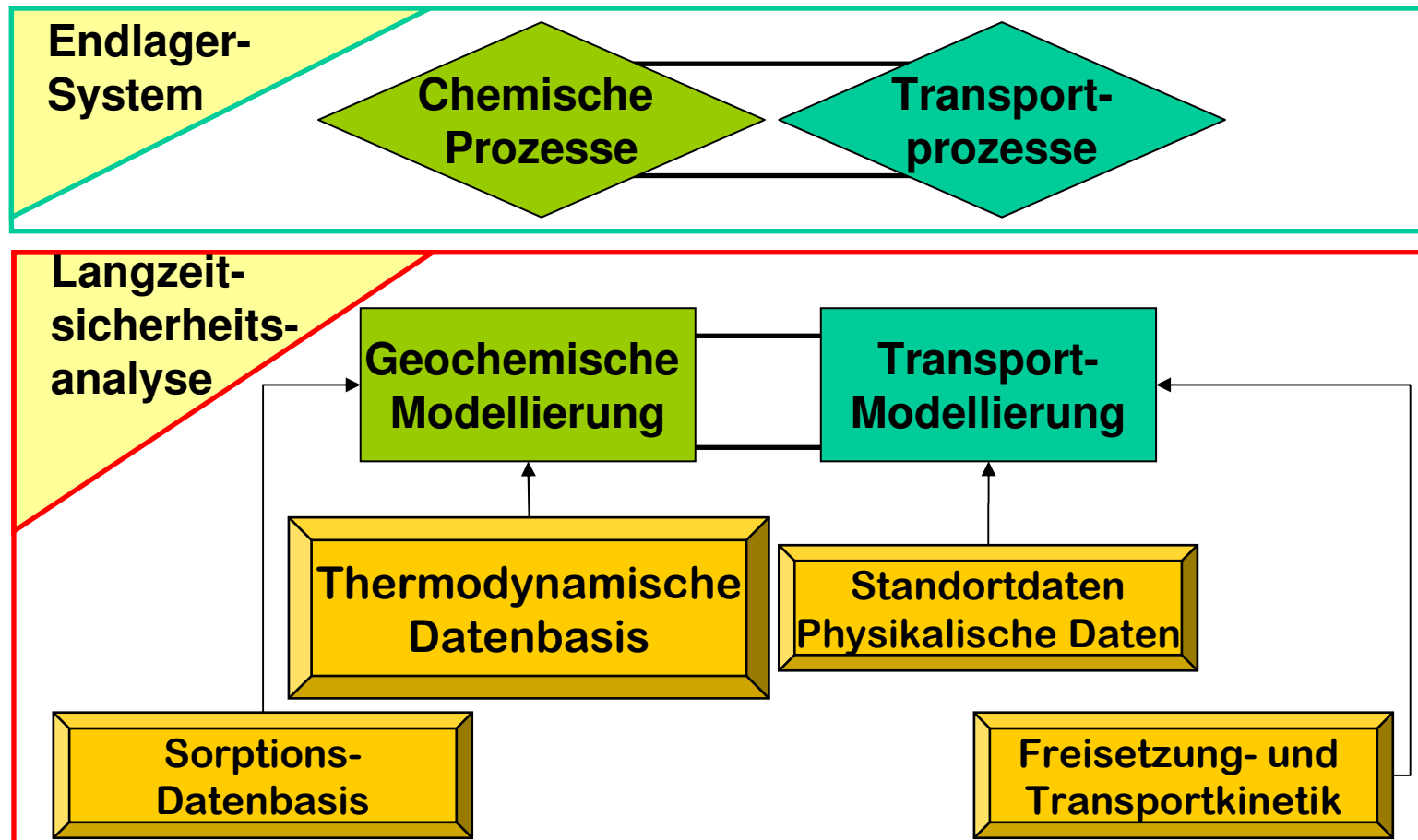
## Gliederung

- Motivation
  - Benötigte Daten
  - Anforderungen
  - Qualitätsmanagement
  - Technische Umsetzung
  - Arbeiten an der Datenbasis
  - Ausblick
-

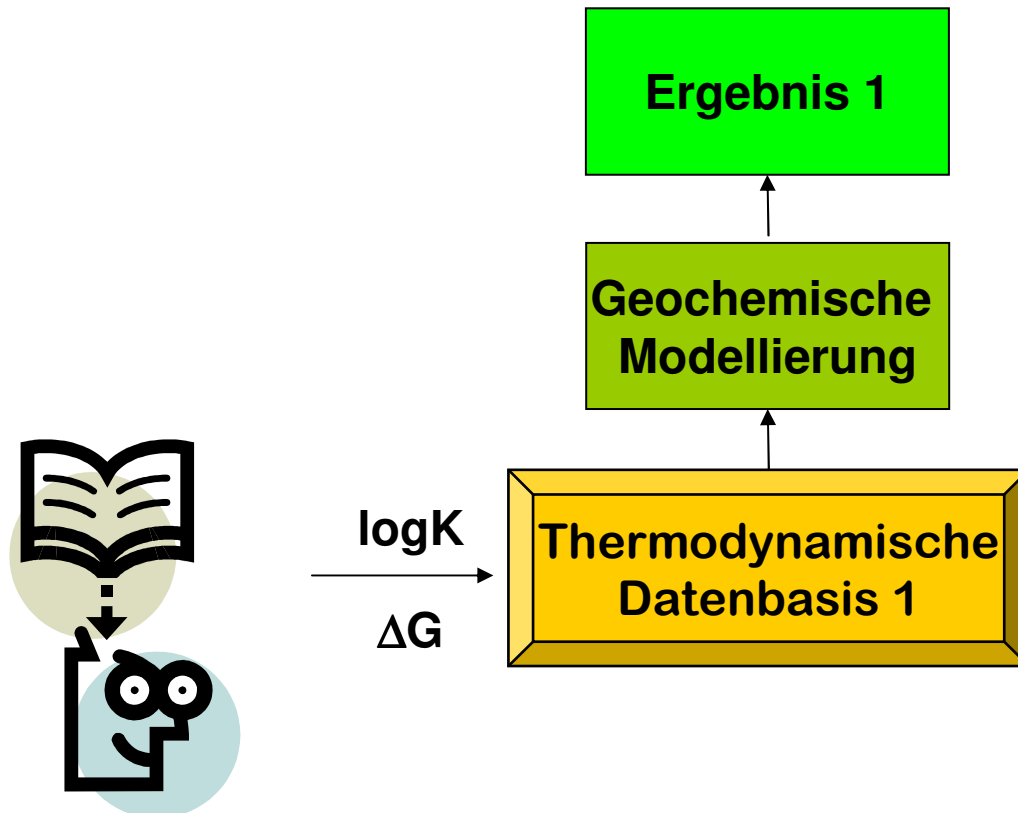
## Geochemische Modelle in der Langzeitsicherheitsanalyse



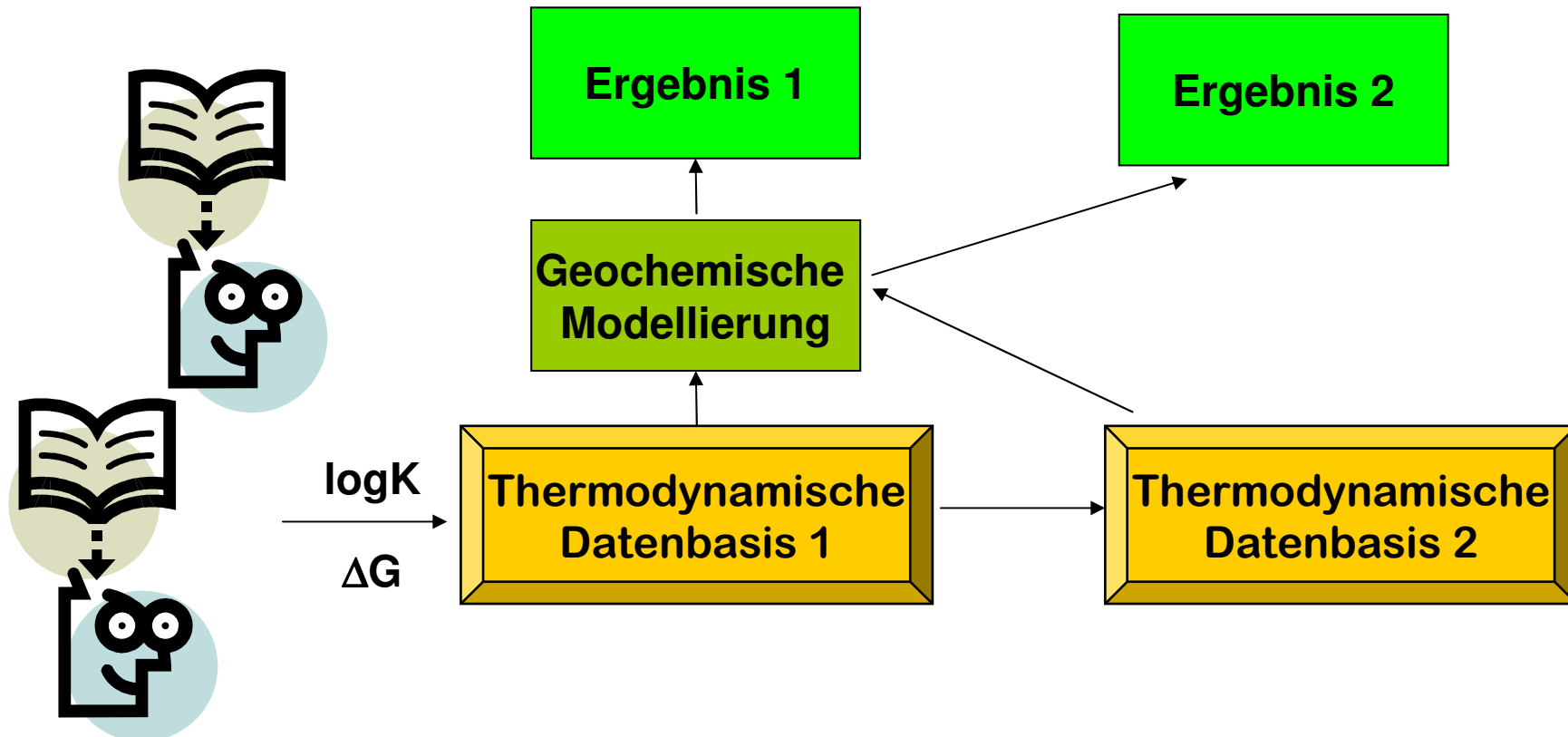
## Geochemische Modelle in der Langzeitsicherheitsanalyse



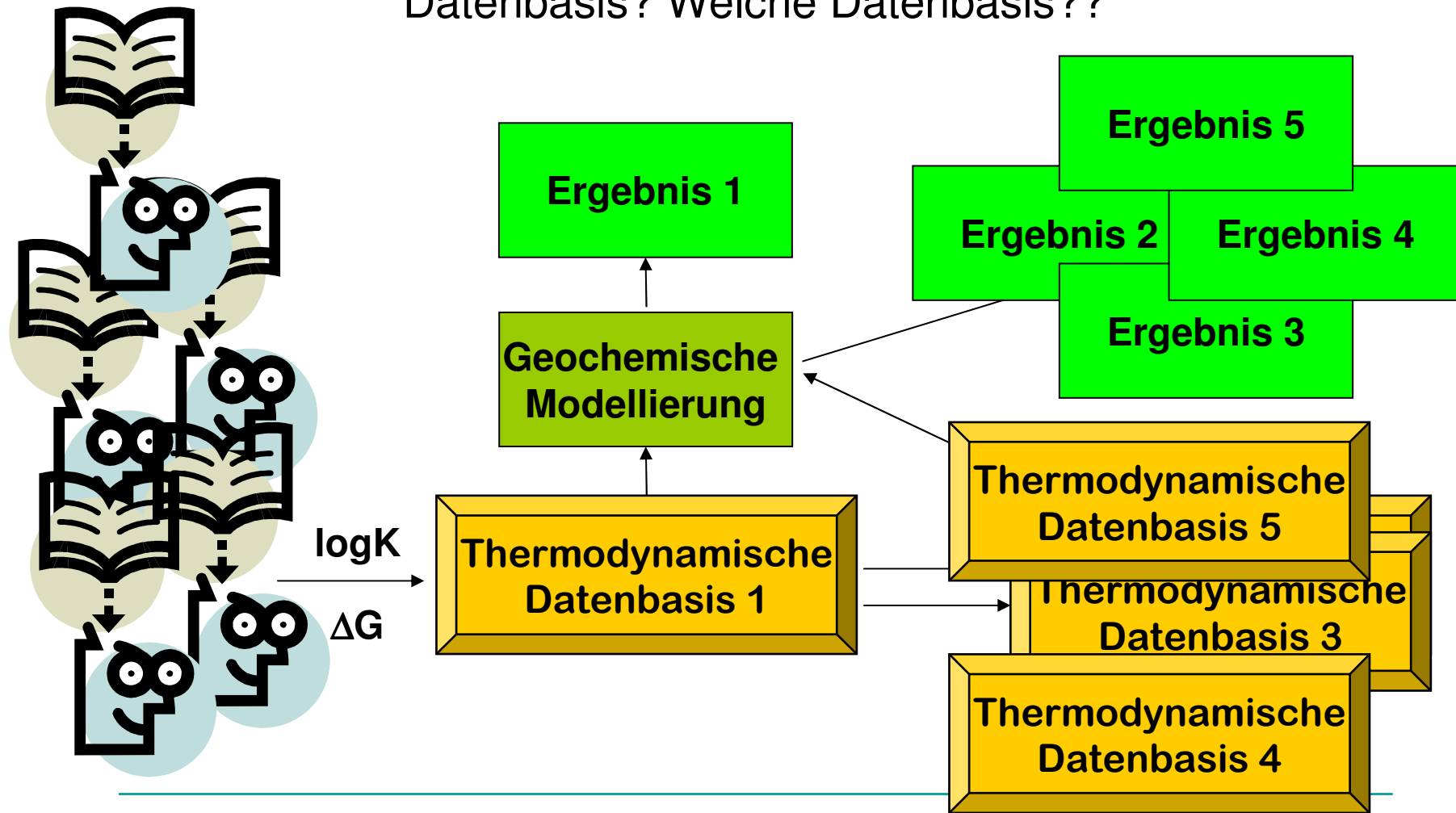
## Datenbasis? Welche Datenbasis??



## Datenbasis? Welche Datenbasis??



# Datenbasis? Welche Datenbasis??



---

## Lösungsmöglichkeit:

- Schaffung einer einheitlichen, qualitätsgesicherten Datenbank für thermodynamische Daten
  - Bündelung von Kompetenzen
  - Leichte Verfügbarkeit über das Internet
  - Bereitstellung codespezifischer Parameterdateien
-



Lösungsmöglichkeit:



## Welche thermodynamischen Daten werden benötigt?

### Elemente

- Wirtsgesteinskomponenten (ozeanisches System + Si, Al, Fe...)
- Abfallkomponenten + Zerfallsprodukte (Radionuklide / Schwermetalle)

### Datentypen

- Löslichkeitskonstanten
- Komplexbildungskonstanten
- Ionenwechselwirkungsparameter (Pitzer, SIT)
- Bildungsenthalpien, Entropien
- Molvolumina

## Anforderungen

Stoffliche Relevanz	Daten für alle relevanten Spezies und Festphasen
Anwendbarkeit auch in hochsalinaren Lösungen	Pitzer- und SIT-Parameter
Konsistenz	Automatisierte Berechnung abhängiger Daten
Rückverfolgbarkeit	... bis zur Primärquelle, vor allem auch von berechneten Daten
Qualitätssicherung	Qualitative Dateneinstufung, Unsicherheiten, Validierung, Dokumentation, Nutzerfreundlichkeit
Verwendbarkeit	Automatisierte Erstellung Code-spezifischer Parameterdateien

---

## Qualitätsmanagement: Richtlinien

- Grundlage jeglicher Dateneingabe und -bewertung
  - Definition von:
    - Geltungsbereich der TDB
    - Nomenklatur von Reaktionen und Datentypen
    - Methodik der Datenbewertung
    - Ionenstärke- und Temperaturkorrektur
  - Aufbauend auf den Guidelines der NEA-TDB
  - Bestandteil des Nutzerhandbuches
-

# Technische Umsetzung

- Relationale Datenbank  
... Organisation in Tabellen

Tabelle 9: Die Isenja-Propagator

Jahr 1. und 4. Messungsgang zusammengefasst, April 1983 bis September 1987

Isenja	Temperatur	Druck	Isenja	Temperatur	Druck	Isenja	Temperatur	Druck
1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
...	...	...	...	...	...	...	...	...

Isenja	Temperatur	Druck	Isenja	Temperatur	Druck	Isenja	Temperatur	Druck
1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
...	...	...	...	...	...	...	...	...

Isenja	Temperatur	Druck	Isenja	Temperatur	Druck	Isenja	Temperatur	Druck
1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
...	...	...	...	...	...	...	...	...

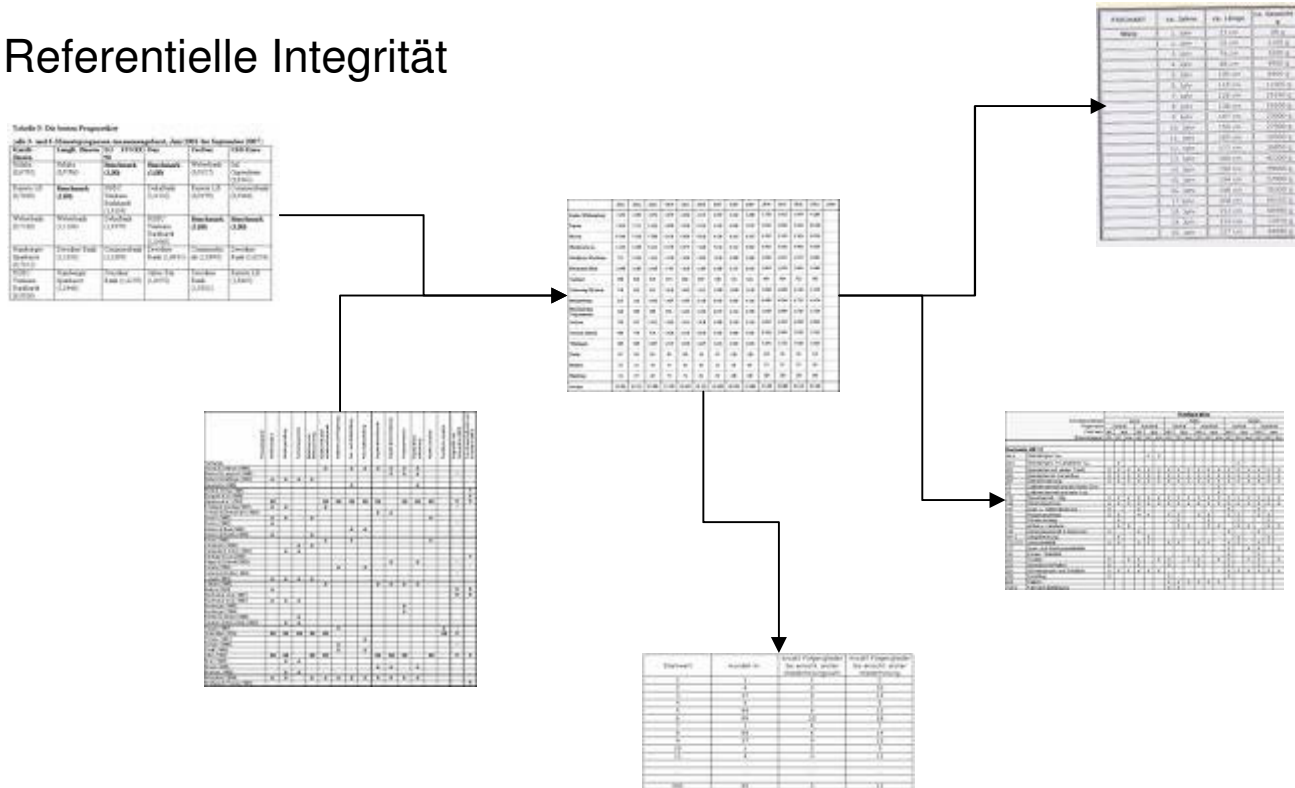
Isenja	Temperatur	Druck	Isenja	Temperatur	Druck	Isenja	Temperatur	Druck
1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
...	...	...	...	...	...	...	...	...

Isenja	Temperatur	Druck	Isenja	Temperatur	Druck	Isenja	Temperatur	Druck
1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
...	...	...	...	...	...	...	...	...

Isenja	Temperatur	Druck	Isenja	Temperatur	Druck
1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
...	...	...	...	...	...

# Technische Umsetzung

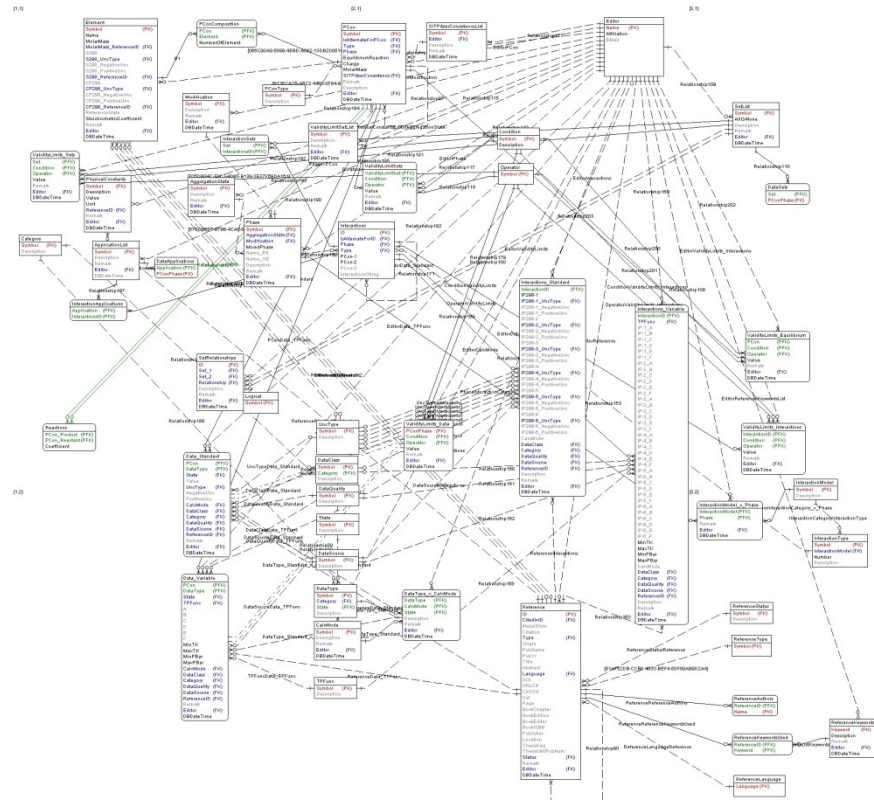
- Relationale Datenbank  
... Referentielle Integrität



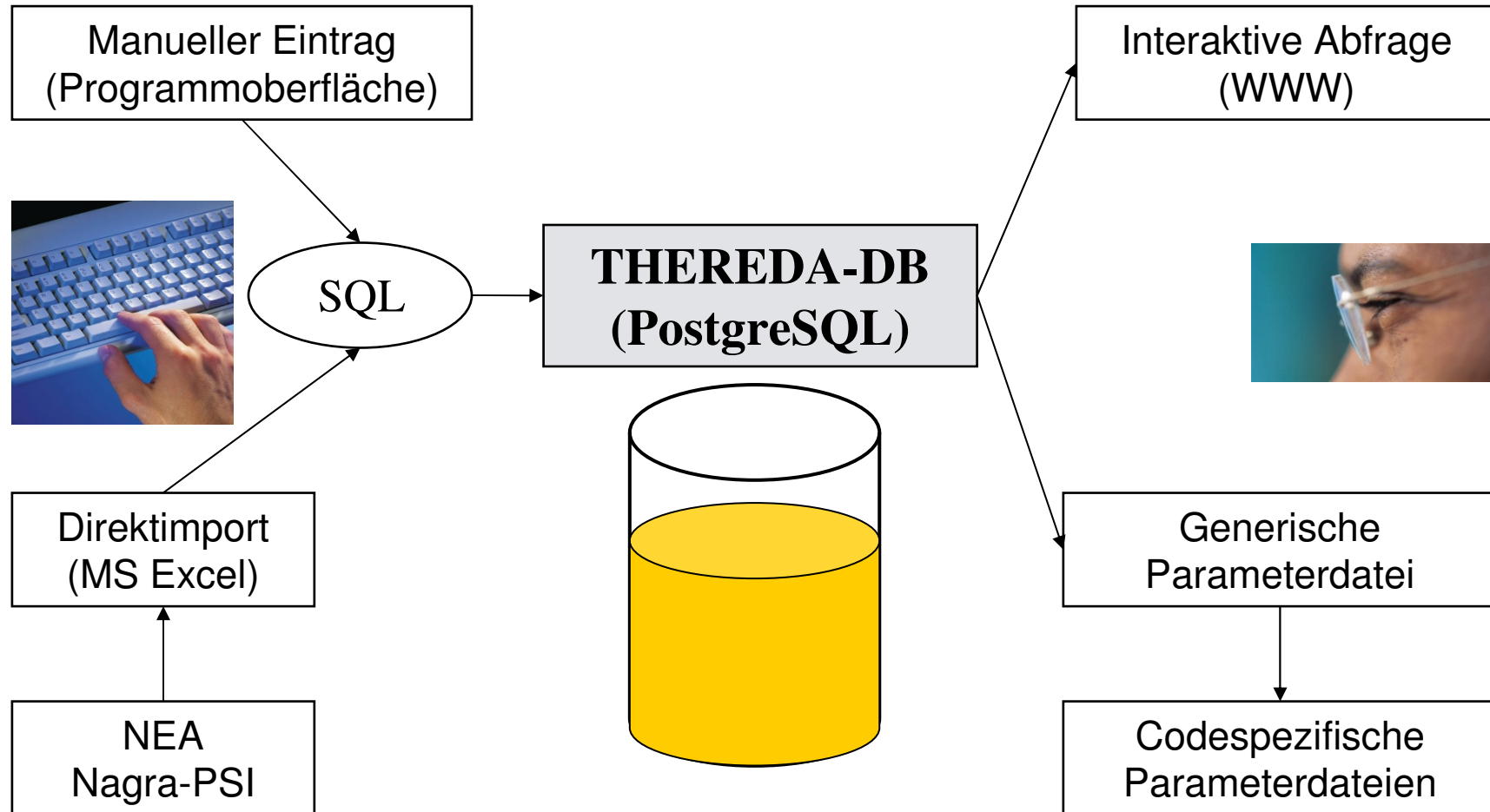


# Technische Umsetzung

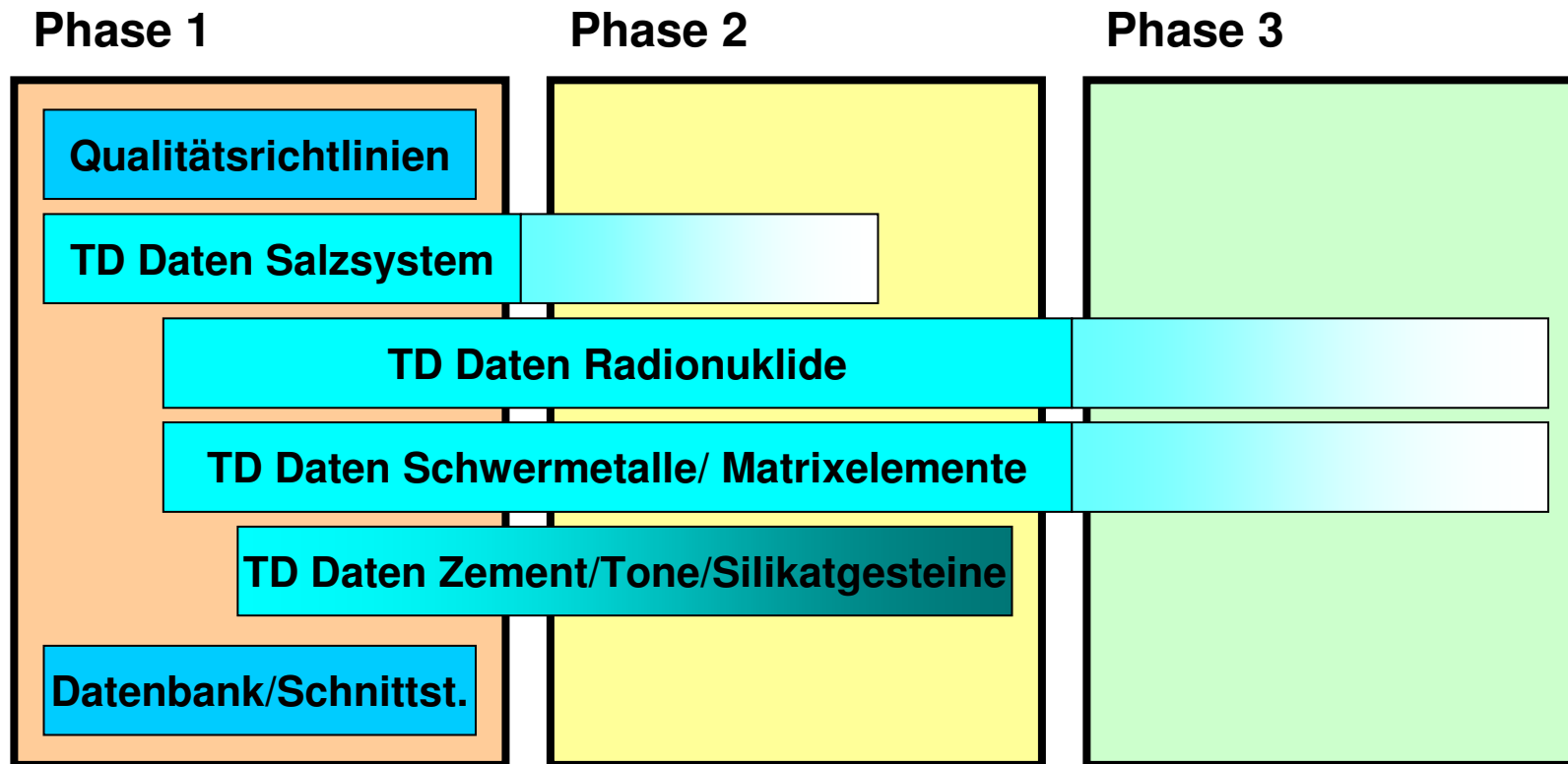
- Komplexität
  - Tabellen: 56
  - Spalten > 370
  - Beziehungen ~ 120





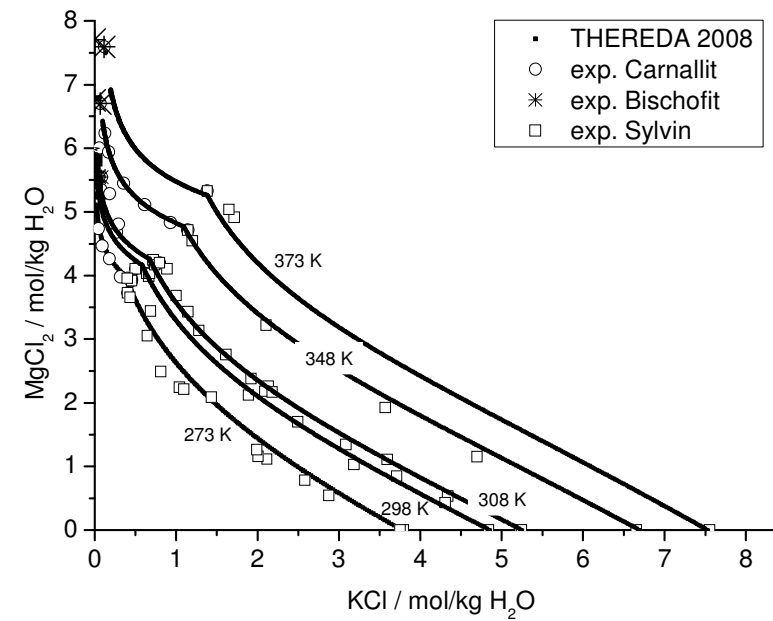


## Projektphasen (Zeitplan)



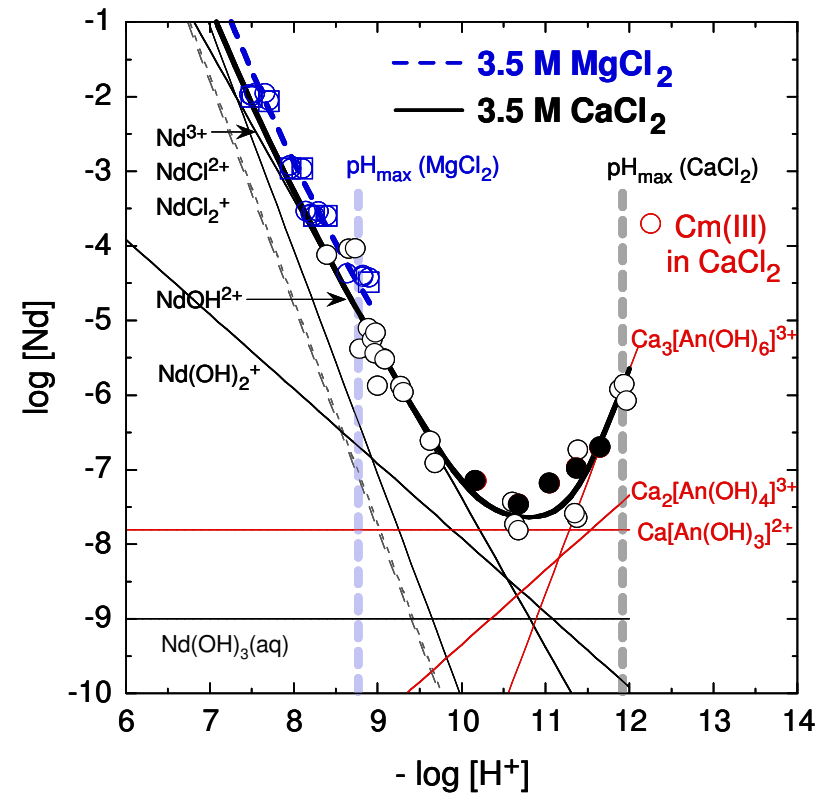
## Datenbasis: ozeanisches System

- Arbeiten am hexären System Na-K-Mg-Ca-Cl-SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O kurz vor dem Abschluß
- Temperatur 0 – 120 °C, in einzelnen Systemen auch höhere Temperaturen möglich



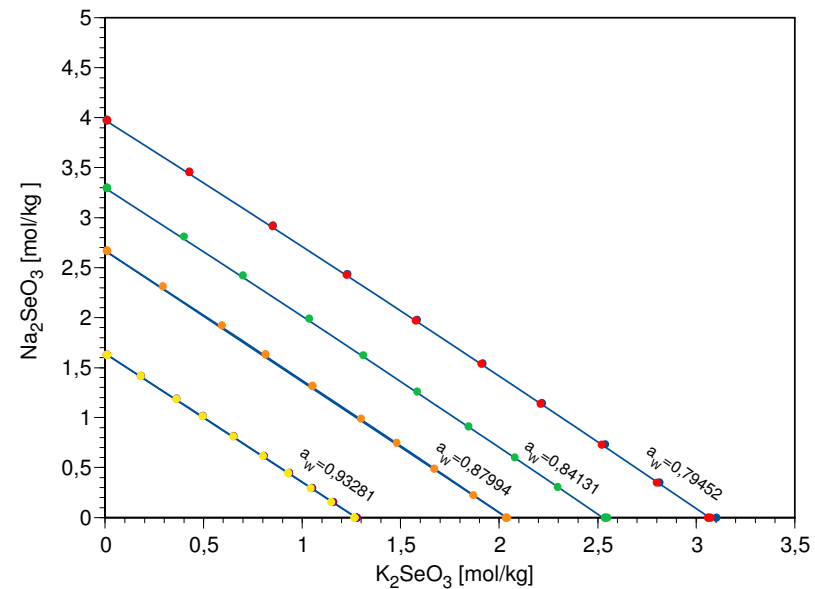
## Datenbasis: trivalente Actinide

- Analogiekonzept: Nd(III) → Cm(III), Am(III)
- Modellierung von An(III) in in konzentrierten NaCl-, MgCl<sub>2</sub>- und CaCl<sub>2</sub>-Lösungen
- Bislang unbekannte, ternäre Ca-An(III)-OH-Komplexe



## Datenbasis: Iod und Selen, Schwermetalle

- Einpflegen von Daten der GRS-Datenbasis
- Insbesondere auch Daten für untersättigte Systeme aus isopiestischen Messungen



## Datenbasis: Zementphasen

- Identifikation relevanter Zementphasen
- Umrechnung vorhandener Daten auf der Basis der NEUEN Daten für das System der ozeanischen Salze
- Absehbar: Untersuchungsbedarf Mg-haltiger Zementphasen

## Datenbasis: Uran

- Erweiterung der NEA-Datenbasis um zusätzliche Spezies und Festphasen
- Aktualisierung der NEA-Daten für Uran (1992)
- Festphasen ohne Relevanz werden erfaßt, aber nicht in die THEREDA-Datenbasis aufgenommen

## Zusammenfassung und Ausblick (1)

- Erste in sich konsistente thermodynamische Datenbasis für das hexäre System der ozeanischen Salze bis 393 K
- Beschreibt erstmals zuverlässig Umlöseprozesse im Salzsysteem einschließlich der sauren und basischen Lösungen in diesem Temperaturbereich
- Thermodynamische Referenzdaten über das Internet abrufbar



## Zusammenfassung und Ausblick (2)

- Operative Phase
  - Codespezifische Parameterdateien verfügbar
  - Instrument zur Forschungssteuerung und Qualitätssicherung für Behörden, Dienstleister und Forschungsinstitutionen
  - Zukünftige Erweiterungen der thermodynamischen Datenbasis im Verbund mit THEREDA



Startseite

Mittwoch, 23. April 2008



**Startseite** →

THEREDA Projekt

THEREDA Partner

THEREDA Interaktiv

THEREDA Kontakte

FAQ

Downloads

Nachrichten

Links

Sitemap

Suche

Wer ist Online?

**Login Form**

Benutzername

Passwort

Angemeldet bleiben

Anmelden

[Passwort vergessen?](#)

## WILLKOMMEN BEI THEREDA

**THEREDA** (Thermodynamische Referenzdatenbasis) ist ein Forschungsprojekt, welches im Jahr 2006 gestartet wurde. Hauptziel ist die Erstellung einer umfassenden und intern konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für die geochemische Modellierung der Nah- und Fernfeldprozesse in verschiedenen Gesteinsformationen, welche als potenzielle Endlager in Deutschland diskutiert werden. Das Projekt wird gemeinsam von den wichtigsten Forschungsinstitutionen, die auf dem Gebiet der Endlagerung von radioaktiven und (chemo)toxischen Abfällen arbeiten bilden, geplant und durchgeführt ([THEREDA-Partner](#) und [Projektförderung](#)).

Parallel zum Aufbau der Datenbasis wird diese Webseite erstellt. Das Portal soll künftig sowohl potentiellen Nutzern den Zugang zur Datenbasis ermöglichen als auch als Informations- und Diskussionsplattform zur Datenbasis dienen. Da Datenbasis und Webseite noch im Aufbau sind, sind [Kommentare](#) und [Anregungen](#) ausdrücklich erwünscht.

Weitere Details zum THEREDA-Projekt finden Sie in der [Einführung](#) und im Handbuch zur Datenbank, wobei letzteres nach Fertigstellung angeboten wird.

## NEUIGKEITEN: ERWEITERUNG DER LINKLISTE

Unter "Links" im Hauptmenü finden Sie jetzt neben Informationen zu den Projektpartnern und anderen thermodynamischen Datenbanken eine Zusammenstellung relevanter Software für die geochemische Speziationsmodellierung und den gekoppelten Transport.

# Besuchen Sie uns!

[www.thereda.de](http://www.thereda.de)

**Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!**

