

## Internationale Vernetzung

Der THEREDA-Verbund hat sich vielfach der interessierten Fachöffentlichkeit präsentiert und dabei ein starkes nationales und internationales Interesse hervorgerufen. So besteht für salinare Systeme ein langjähriger, produktiver Austausch mit Mitarbeitern der Los Alamos National Laboratories (LANL) und Sandia National Laboratories (SNL) in den USA sowie der Nuclear Waste Management Organization (NWMO) in Kanada. Die Vorhabenergebnisse wurden zudem mit Kollegen und Anwendern aus Belgien, Frankreich, England, Spanien, Südkorea, Japan und der Schweiz diskutiert, wobei durchweg ein sehr positives Feedback zur Herangehensweise, Struktur und Nachvollziehbarkeit innerhalb des Projekts THEREDA erhalten wurde. Damit ist das Projekt exzellent in der nationalen und internationalen Community etabliert und wird in vieler Hinsicht als beispielhaftes Referenzprojekt angesehen.

## Referenzen

H. C. Moog, F. Bok, C. M. Marquardt, V. Brendler (2015): Disposal of Nuclear Waste in Host Rock formations featuring high-saline solutions - Implementation of a Thermodynamic Reference Database (THEREDA). Appl. Geochem. (55) 72-84.

# Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle

## Projekt THEREDA

### Thermodynamische Referenzdatenbasis

## Kontakt

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Bereich Endlagersicherheitsforschung, Braunschweig, Dr. Helge Moog, [helge.moog@grs.de](mailto:helge.moog@grs.de)  
[www.thereda.de](http://www.thereda.de)

## Projektpartner

- Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Institut für Ressourcenökologie, Dresden
- Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, Abteilung Prozessanalysen, Braunschweig
- Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Nukleare Entsorgung, Eggenstein-Leopoldshafen
- Paul Scherrer Institut (CH), Bereich Nukleare Entsorgung und Sicherheit, Labor für Endlagersicherheit, Villigen, Schweiz
- Technische Universität Bergakademie Freiberg, Freiberg

## Abschlussbericht

[www.ptka.kit.edu/downloads/ptka-wte-e/Abschlussberichte-E-Vorhaben.htm](http://www.ptka.kit.edu/downloads/ptka-wte-e/Abschlussberichte-E-Vorhaben.htm)



Betreut vom



Die Forschungsarbeiten wurden in den Vorhaben mit den Förderkennzeichen 02E10709, 02E10699, 02E10146, 02E10136, 02E10126 im Zeitraum 2009-2013 durchgeführt.

Verantwortlich für den Inhalt, Bilder und Bildrechte sind die Autoren bzw. die ausführenden Forschungsstellen. PTKA übernimmt keine Gewähr insbesondere für die Richtigkeit, Genauigkeit und Vollständigkeit der Angaben sowie die Beachtung privater Rechte Dritter.  
PTKA 02/2018



Gefördert durch:



aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages

# Projekt THEREDA

Seit vielen Jahren fördert das BMWi die anwendungsbezogene Grundlagenforschung zur Sicherheit von Mensch und Umwelt und damit zur Daseinsvorsorge. Auf dem Gebiet der untertägigen Entsorgung von radioaktiven Abfällen betrifft dies im Wesentlichen die Förderung von Arbeiten, die zur kontinuierlichen Verbesserung der Sicherheit vor potenziellen, insbesondere langzeitlichen Gefahren der Abfälle einen Beitrag leisten. Weiterhin werden die Kenntnisse zu sicherheitsrelevanten Fragestellungen vertieft sowie die Sicherheitstechnik und Methoden zur Sicherheitsbewertung weiterentwickelt.

Daher werden die Löslichkeit und die chemische Form gefährlicher Substanzen, die aus radioaktiven oder chemotoxischen Abfällen im Kontakt mit Wasser freigesetzt werden können, wissenschaftlich intensiv untersucht. Dabei werden thermodynamische Daten bestimmt, die in Verbindung mit Computermodellen die Berechnung der maximalen Löslichkeit solcher Substanzen in Abhängigkeit von Lösungszusammensetzung und Temperatur erlauben. Die Veröffentlichung dieser Daten in Fachberichten und Artikeln in wissenschaftlichen Zeitschriften erlaubt allerdings noch keine unmittelbare Verwertung dieser Arbeiten.

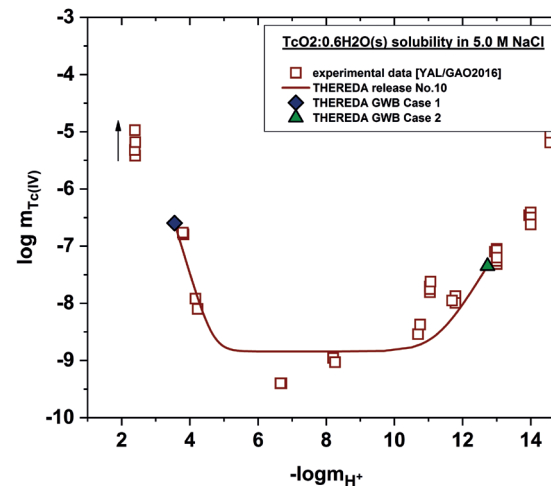
Hier setzt das Projekt THEREDA an: seit 2006 werden Fachberichte und wissenschaftliche Veröffentlichungen aus der ganzen Welt ausgewertet. Transparent evaluierte thermodynamische Daten werden in eine Datenbank eingetragen. Um die Ergebnisse einem breiten Fachpublikum zugänglich zu machen, können diese über das Internet eingesehen werden.

Diese Arbeit erfordert einen breiten, interdisziplinären Ansatz. Daher wird das Projekt THEREDA gemeinsam von fünf Institutionen betrieben, die selbst in den entsprechenden Forschungsfeldern tätig sind. Dies dient der Bündelung von Kompetenzen und stellt die Referenzdatenbasis THEREDA auf eine breite institutionelle Basis.

# Ergebnisse

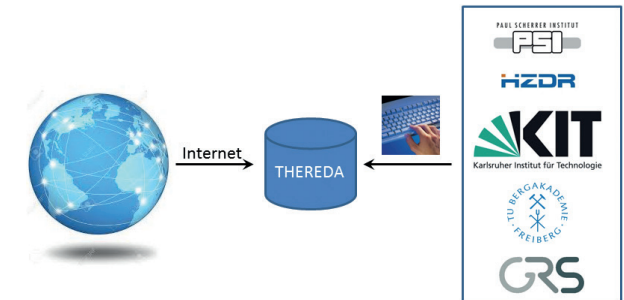
Mit der Referenzdatenbasis THEREDA steht ein technischer Rahmen zur Verfügung, der es den teilnehmenden wissenschaftlichen Experten erlaubt, thermodynamische Daten dezentral zu erfassen. Es werden spezielle Datenfiles generiert, die in Verbindung mit bestimmten Programmen geochemische Modellrechnungen zur Löslichkeit, beispielsweise von Radionukliden, erlauben. Vor der Freigabe in der Datenbank durchlaufen diese Dateien einen Qualitätssicherungsprozess, der sicherstellt, dass die durchgeführten Rechnungen zu richtigen und bei der Verwendung verschiedener Programme vergleichbaren Ergebnissen führen. In den bisher durchgeführten Arbeiten fokussierte sich das Projekt THEREDA auf die Beschreibung salinärer Systeme.

Die in den Datenfiles ausgegebenen thermodynamischen Daten, die die Grundlage der Löslichkeits- und Speziationsrechnung liefern, können über die beigefügte Dokumentation auf die zugrundeliegenden Fachpublikationen und damit auf ihre experimentelle Basis zurückverfolgt werden, wie am Beispiel des Technetiumdioxids ( $TcO_2$ ) in der Abbildung gezeigt. Weiterhin wird auf die Qualität der Daten und somit auf etwaigen Forschungsbedarf hingewiesen.



# Was folgt daraus?

Das Projekt THEREDA repräsentiert eine datenbankgestützte thermodynamische Referenzdatenbasis, die über eine webbasierte, grafische Benutzeroberfläche ausgelesen bzw. mit weiteren Daten gefüllt werden kann.



Mit der Datenbank THEREDA steht Behörden, Dienstleistern und Forschungsinstitutionen ein leistungsstarkes Instrument zur geochemischen Analyse verschiedener relevanter Prozesse bei der untertägigen oder oberflächennahen Entsorgung gefährlicher Abfälle zur Verfügung. In der aktuellen Version kann die Referenzdatenbasis vor allem für die Berechnung von Mobilisierungsprozessen in Lösungen verwendet werden, wie sie im Salzgestein oder in Tonformationen im Norddeutschen Becken auftreten können.

Seit Abschluss des vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) geförderten Vorhabens im Jahr 2013 wird die Datenbasis Zug um Zug erweitert.