



A Contribution to the Long-Term Safety of Repositories for Nuclear and Non- Nuclear Waste

Helge C. Moog

What you should know after this presentation

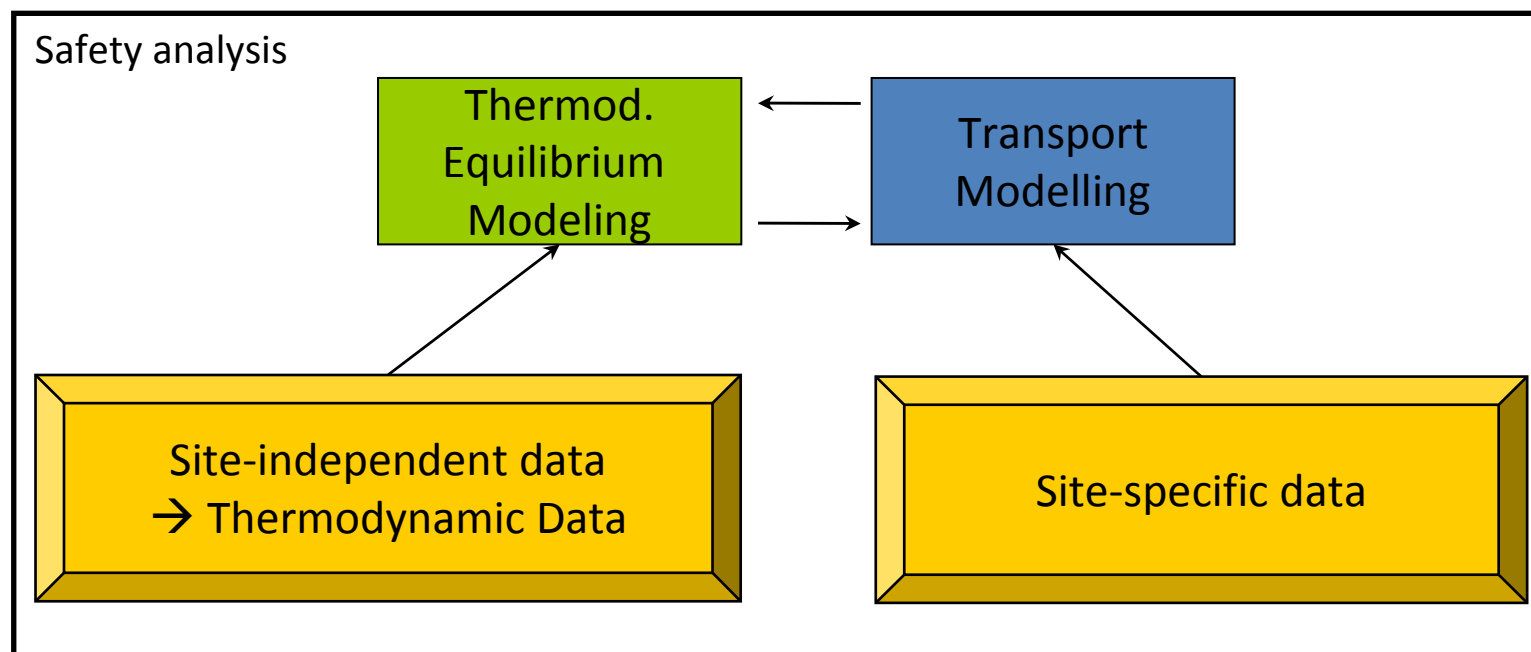
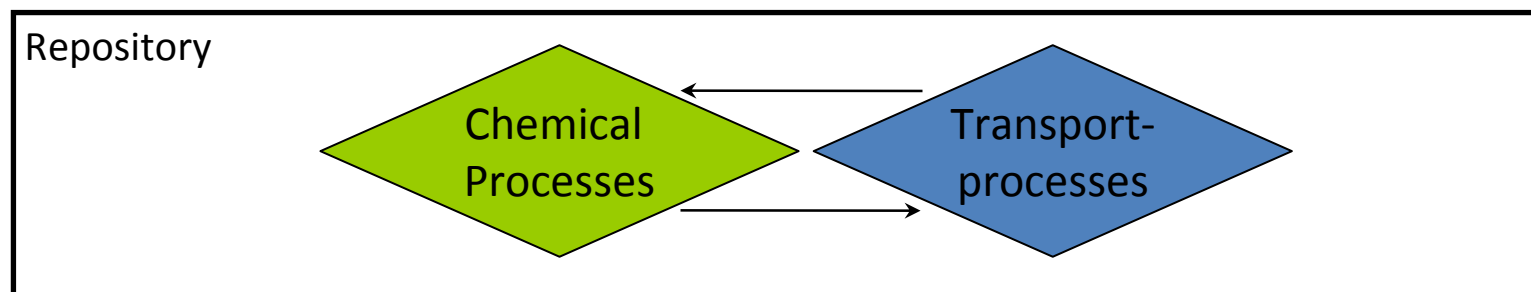
Thermodynamic equilibrium modeling – what do we need it for?

What is necessary to perform a calculation

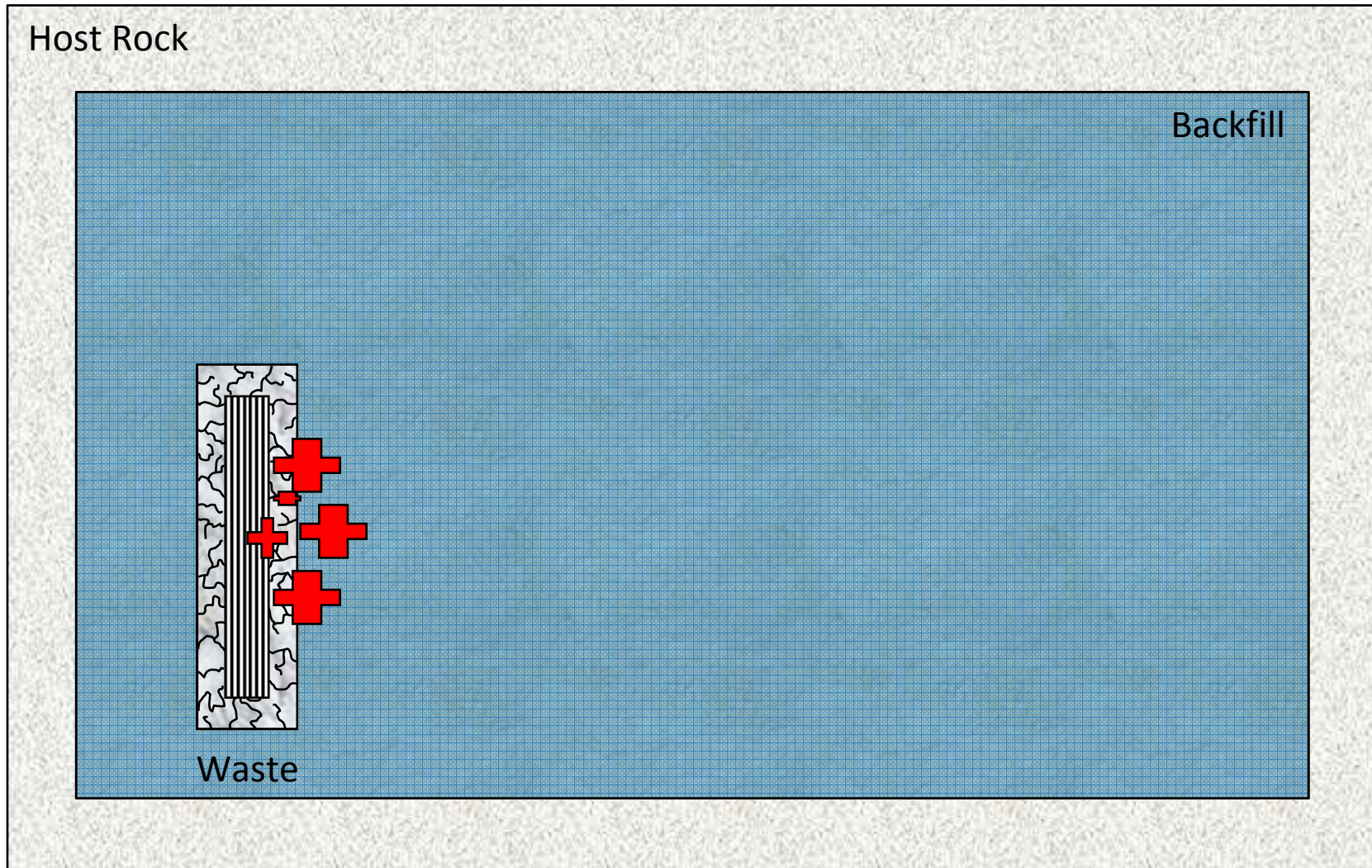
Our concern: reliable model calculations as contribution to safety analysis

-
- THEREDA – a databank for thermodynamic reference data
 - Technology
 - QS-Elements
 - Future prospects

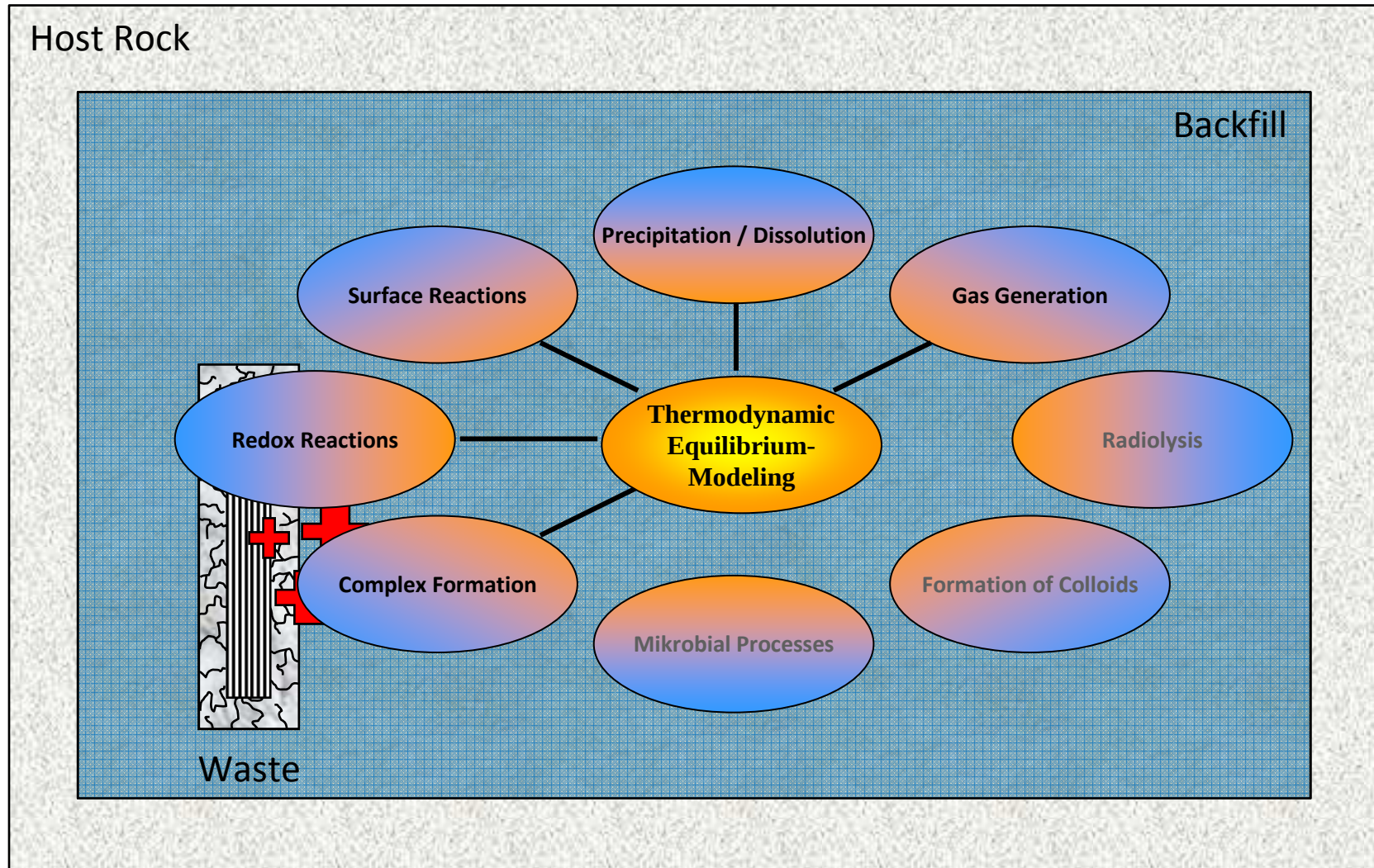
Thermodynamic equilibrium modeling – what do we need it for?



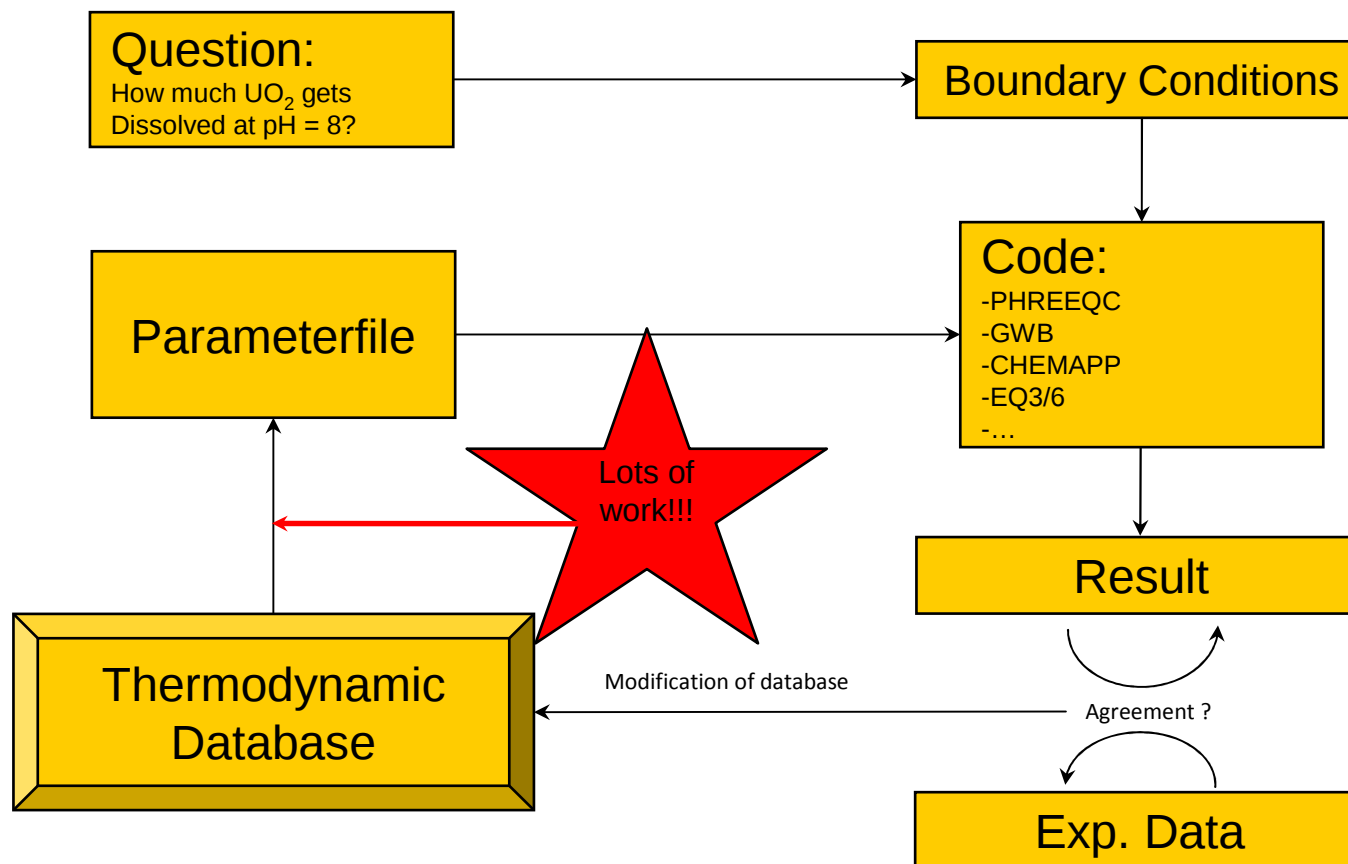
What are „chemical prozesses“?



What are „chemical prozesses“?



What do we need to perform a thermodynamic equilibrium calculation?

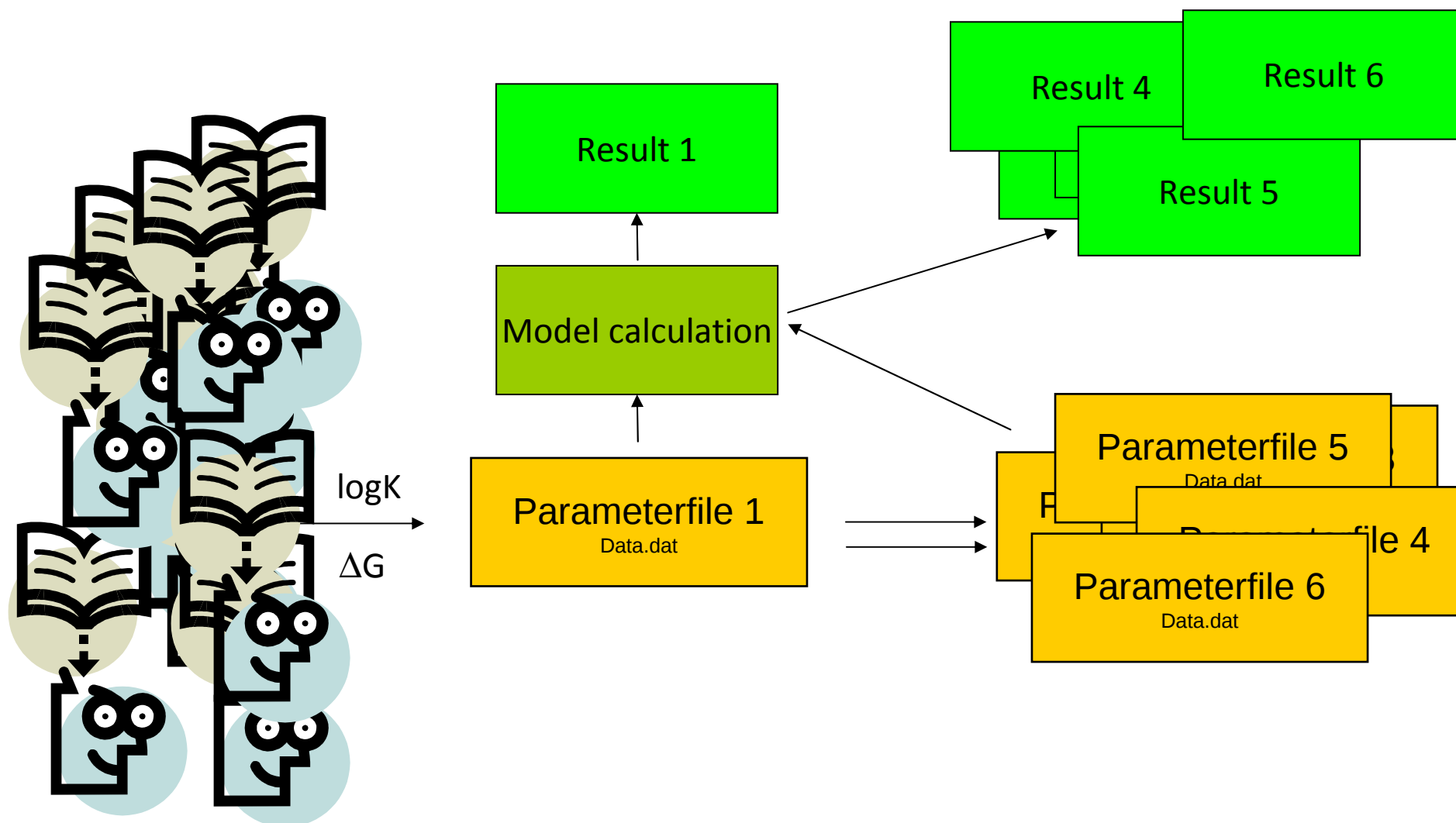


Our concern:
Reliable calculations as contribution to safety analysis

Which „parameterfile“ are we talking about, when it comes safety analysis??!



Thermodynamic Equilibrium Modeling in practise

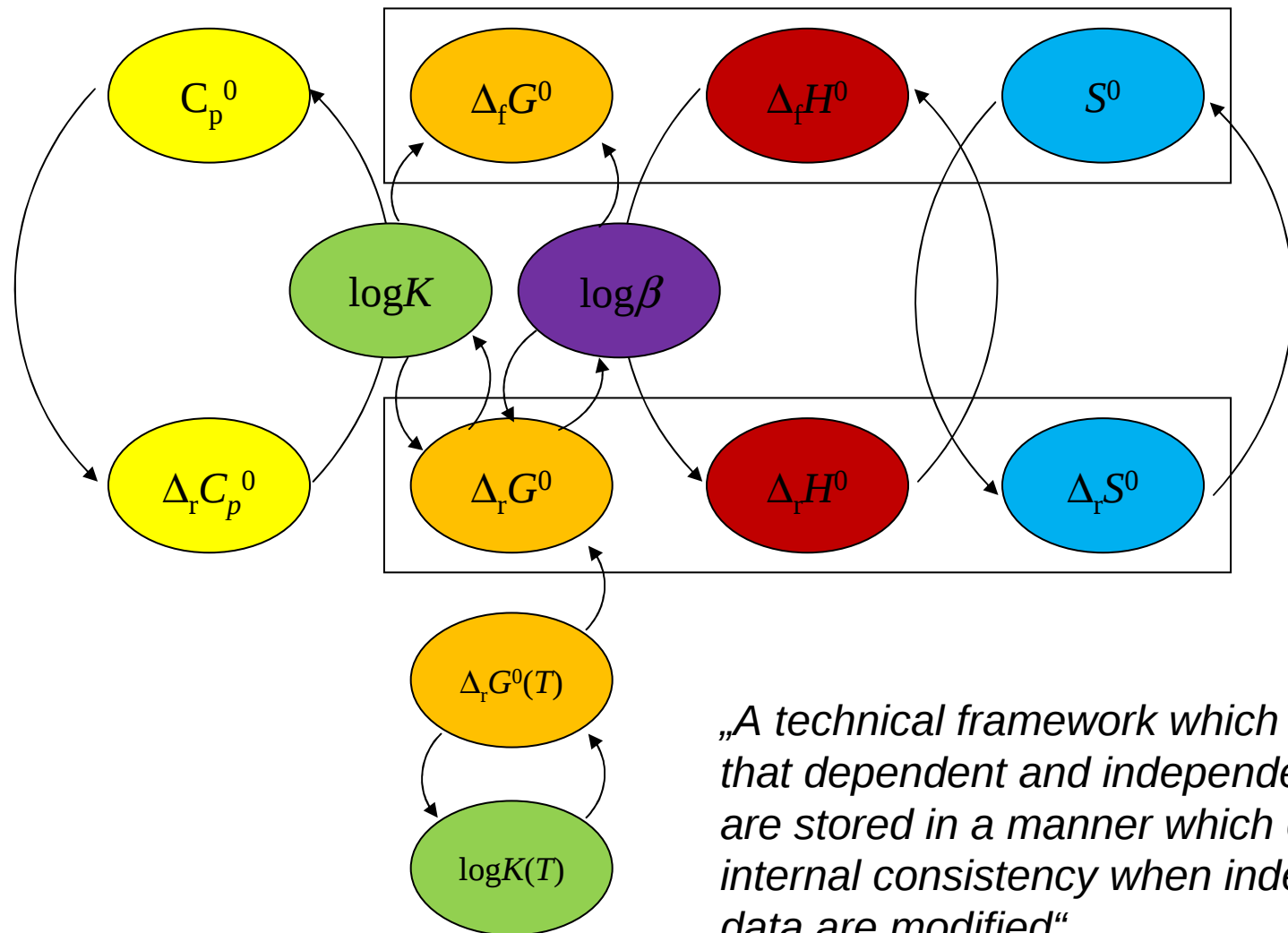


Thermodynamic Equilibrium Modeling in practise

Which result is correct????!

What do we mean by „thermodynamic database“?

Consistency of data



Thermodynamic equilibrium modeling for nuclear and non-nuclear modeling in the future

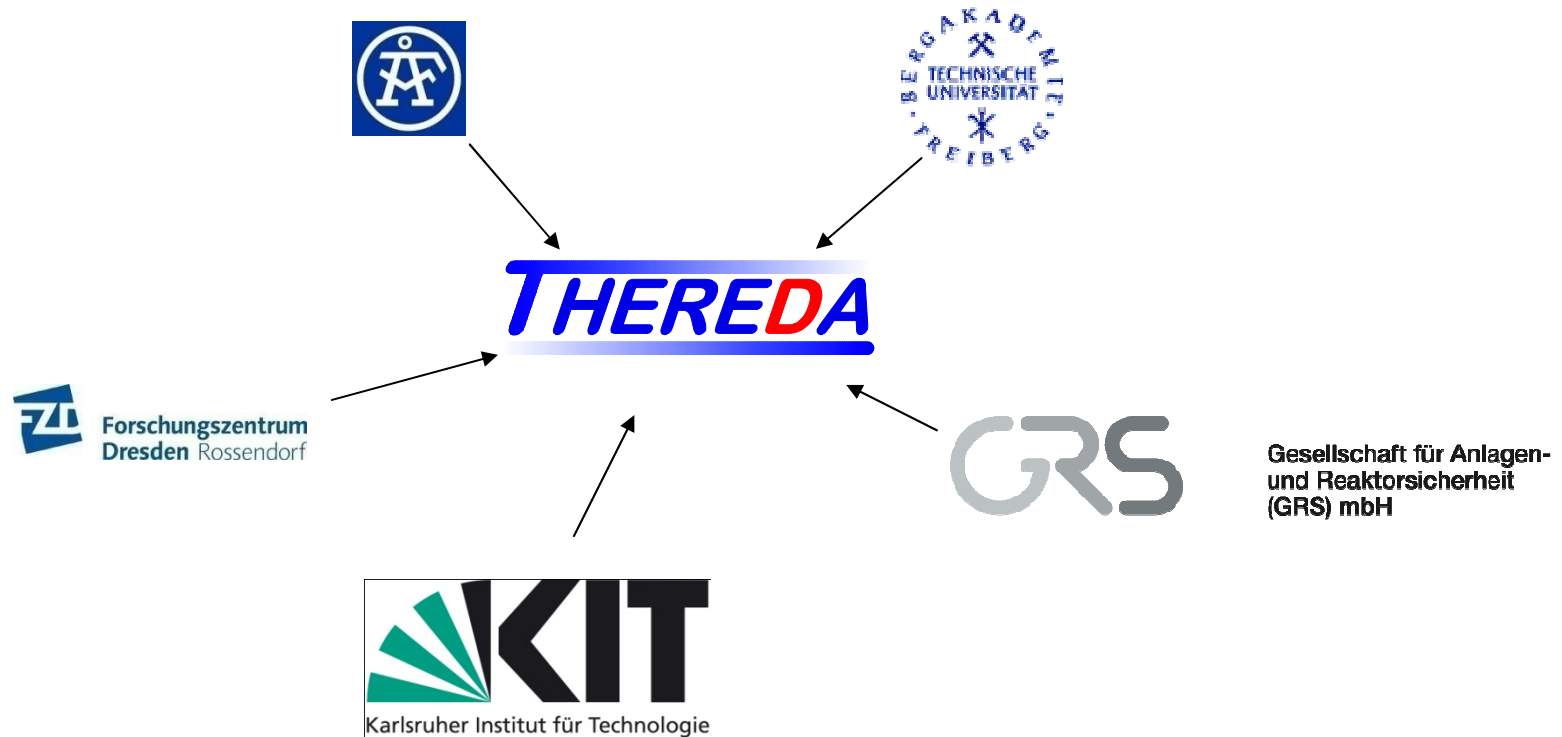
Creation of a consistent, mutually agreed and quality-assured reference database

Joining competences for a common sake

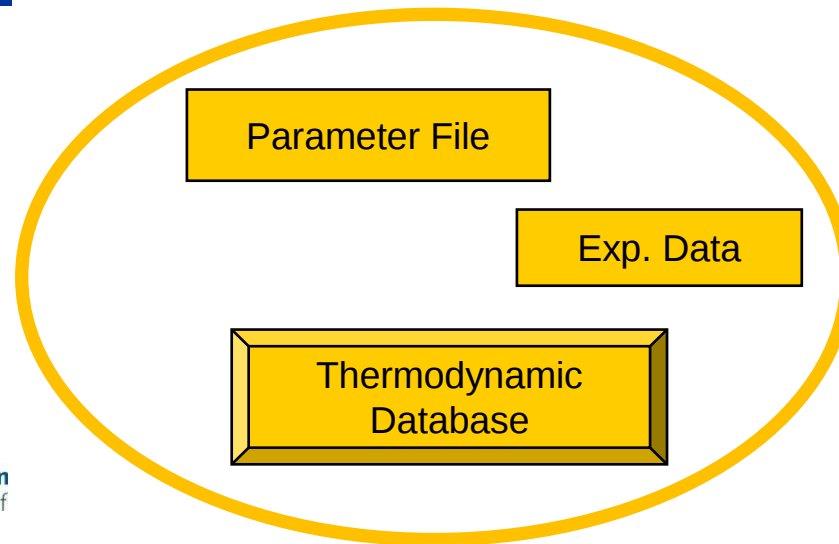
Easy access via the world wide web

Making available ready-to-use parameter files

Thermodynamic equilibrium modeling for nuclear and non-nuclear modeling in the future



Thermodynamic equilibrium modeling for nuclear and non-nuclear modeling in the future



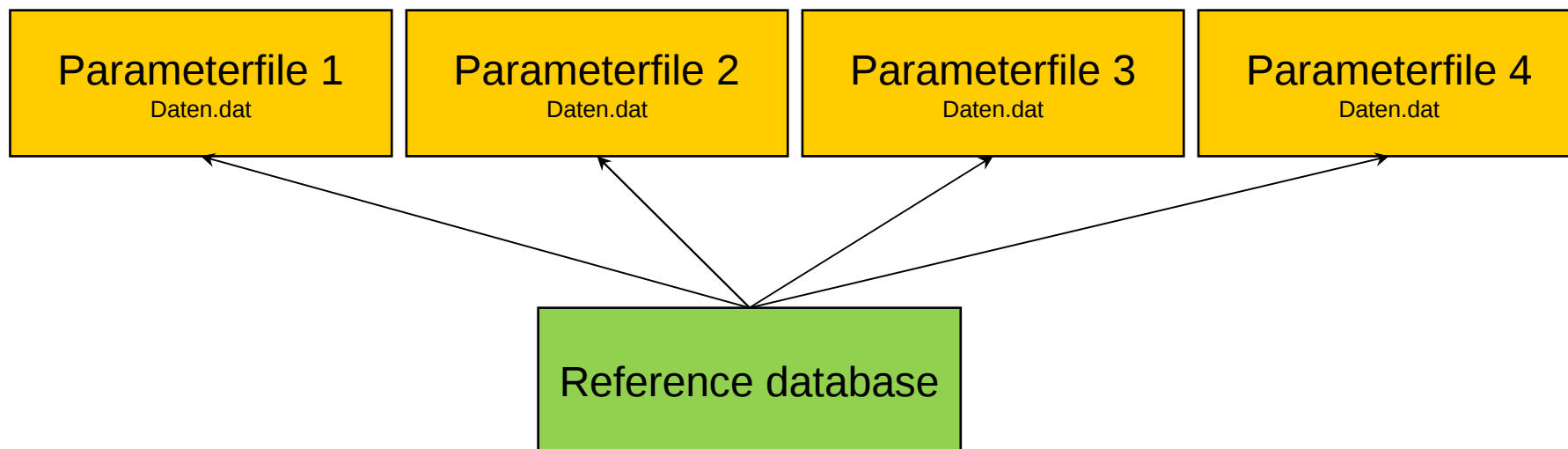
Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH

Modellierung des Gesamtprozesses nur so gut wie die Modellierungsqualität der Einzelprozesse

has; 14.04.2005

Basic idea

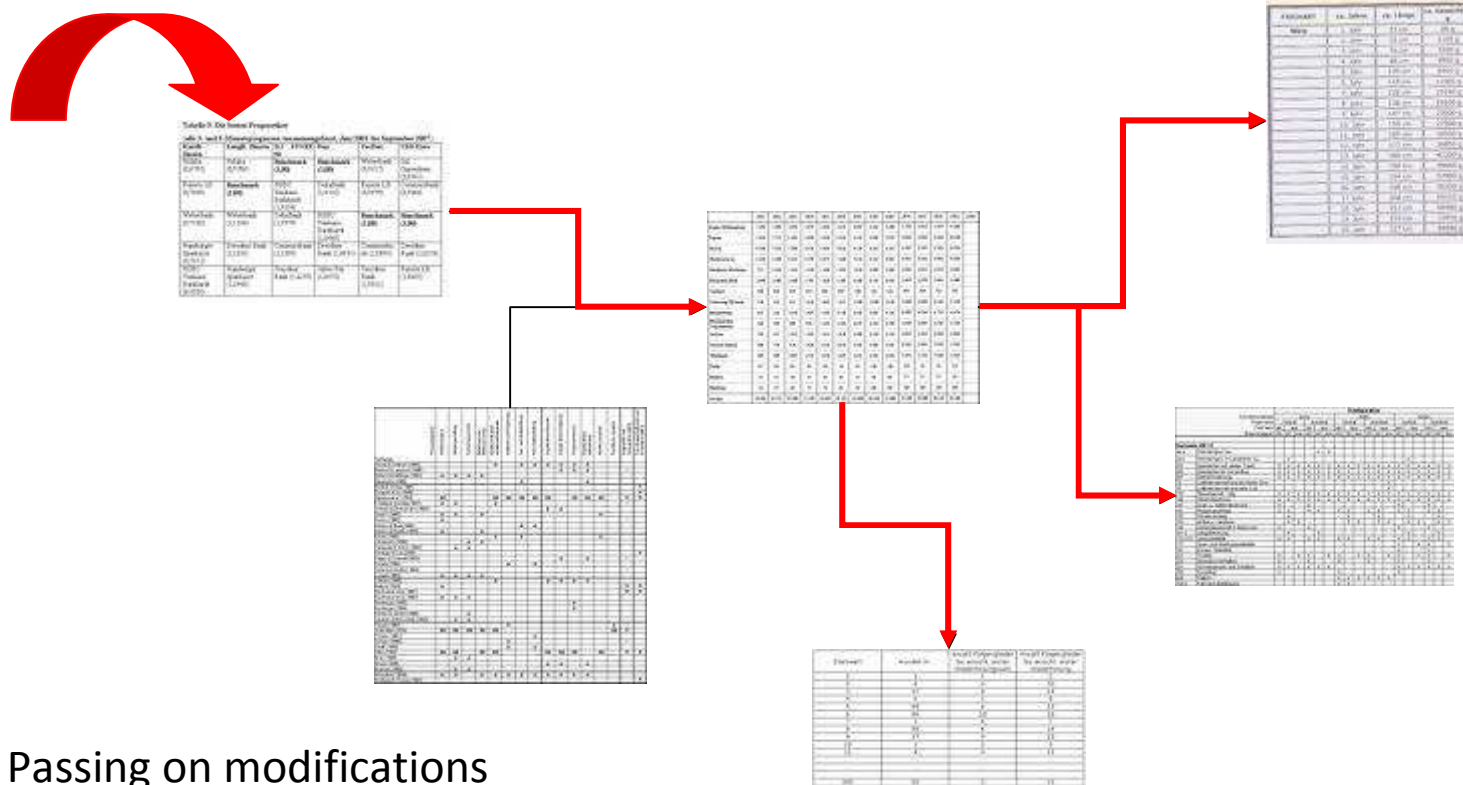
Thermodynamic calculations of various institutions become comparable, by creating parameter files from a common database.



Further project data

- Phase I: 2006-07 bis 2010-03
- Phase II: 2009-10 bis 2013-03
- Funded by two Ministries: BMWi und BMBF, Funding approved by BfS (Federal Office for Radiation Protection) at 3.5. (Letter of Intent)

Technical Basics



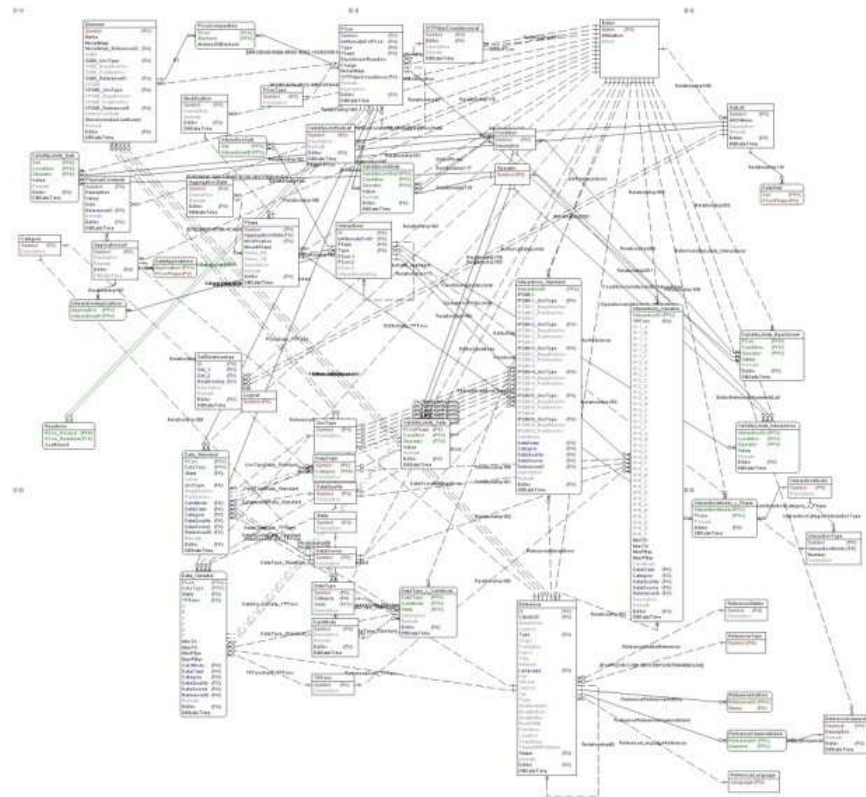
Passing on modifications

Organised in Tables

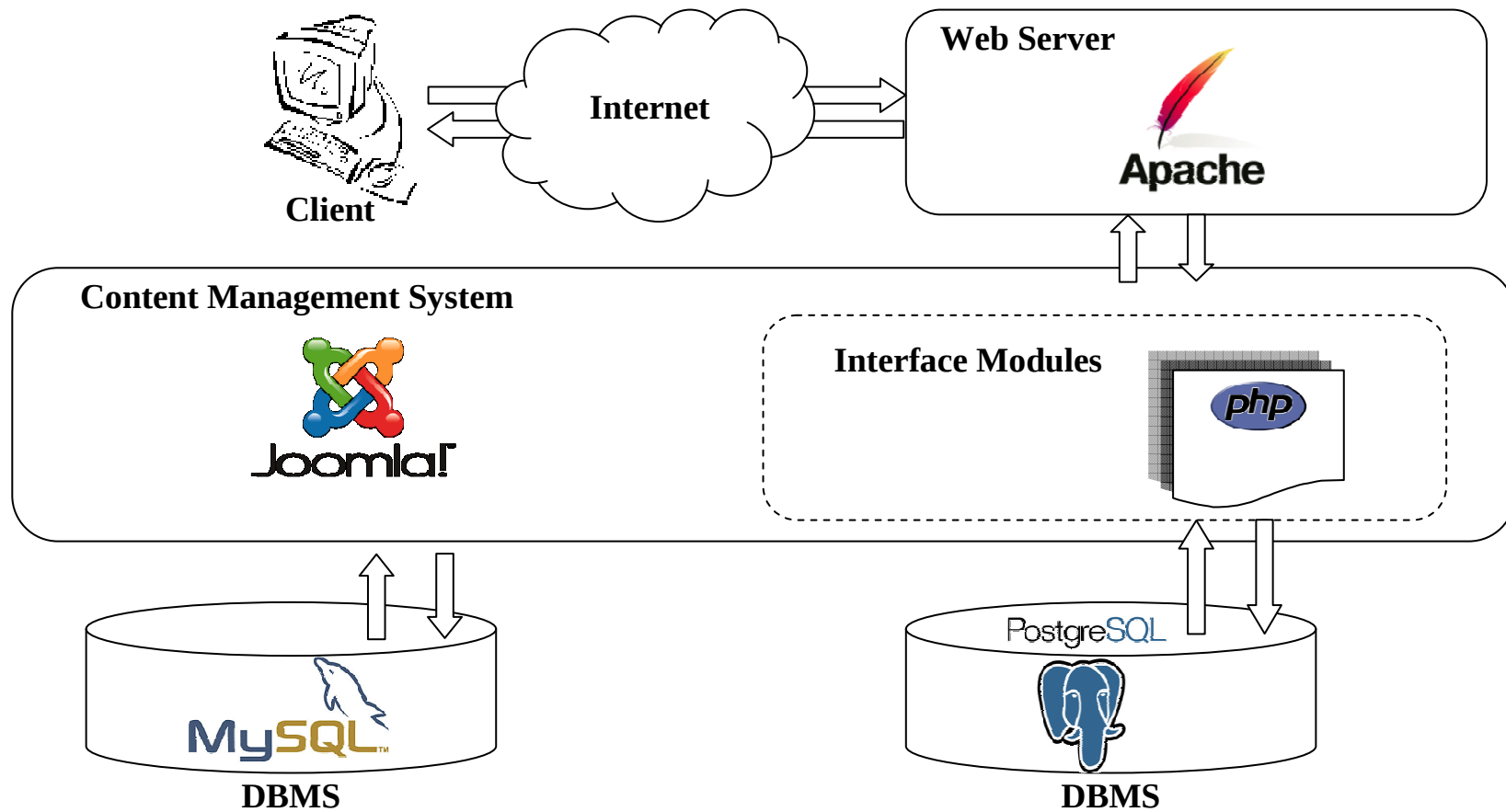
Referential Integrity

Technical Basics

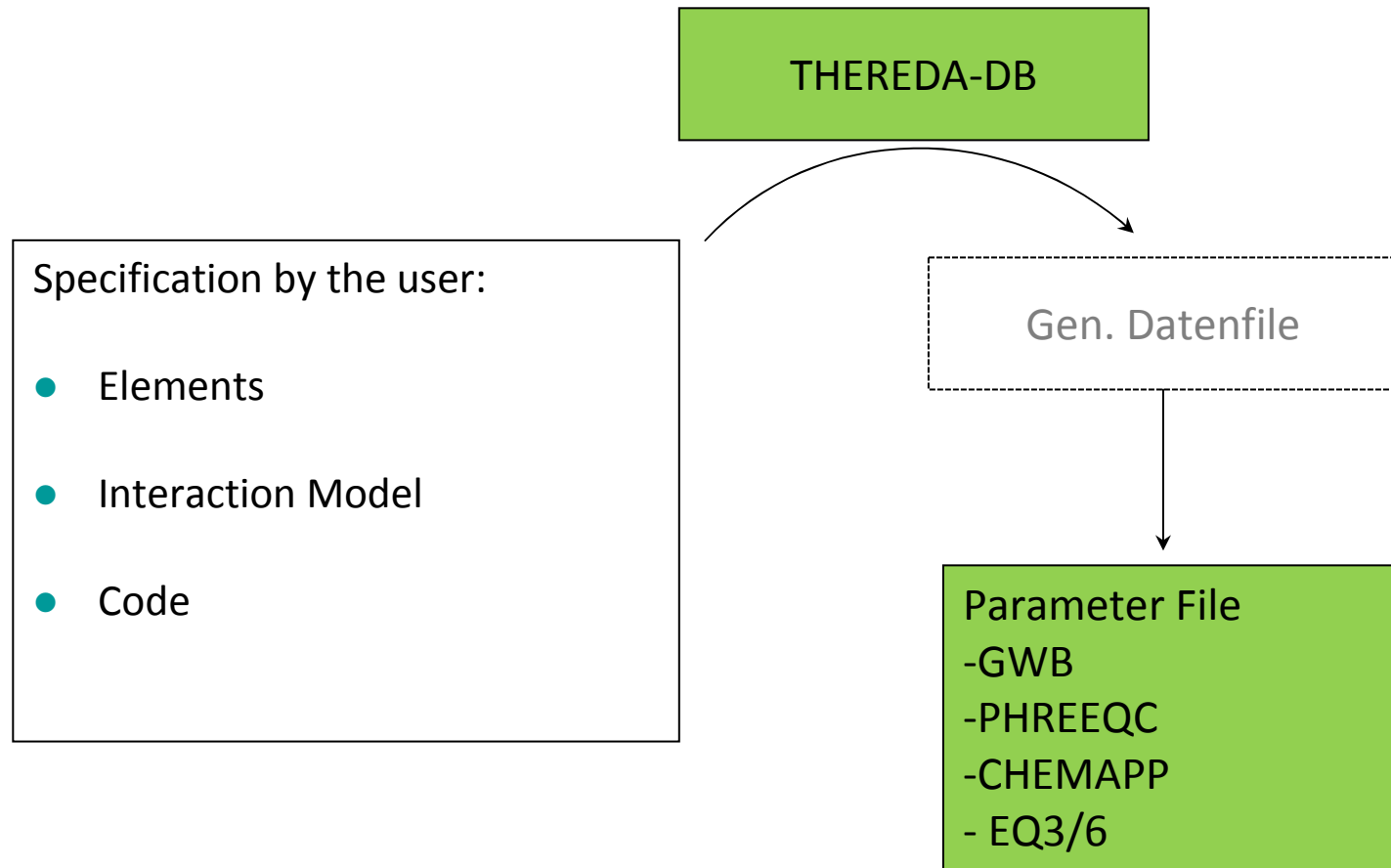
- Datenbanksystem = PostgreSQL
 - Relations: >56
 - Attributes: >370
 - Constraints: >120



Technical Basics



How it is used



Access via World Wide Web

www.thereda.de

Startseite

Freitag, 11. Juni 2010

WILLKOMMEN BEI THEREDA

THEREDA (Thermodynamische Referenzdatenbasis) ist ein Projekt, 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, geplant und durchgeführt ([THEREDA-Partner](#)).

Parallel zum Aufbau der Datenbasis wird diese Webseite erstellt. Das Portal soll künftig sowohl potenziellen 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.

Im Menüpunkt [Downloads](#) finden Sie Dokumente zum THEREDA-Projektstand, Veröffentlichungen und Vorträge.

PROJEKTFÖRDERUNG

Dieses Projekt wird gemeinsam gefördert von [BMBF](#) (GRS: 02C1426/02C1628, FZD: 02C1436, TU-BAF: 02C1446), [BMW](#) (FZK/KIT: 02E10126/02E1067, FZD: 02E10136, GRS: 02E10146, TU-BAF: 02E10709) und [BFS](#) (mit Mitteln des [BMU](#)).

NEWS: THEREDA-FORUM

Neu auf unserer Webseite ist das [THEREDA-Forum](#). Es dient als Informations- und Diskussionsplattform zur Datenbasis und zu Fragen zum Datenzugang. Das Forum ist in verschiedene Kategorien unterteilt, die von den jeweiligen Spezialisten moderiert werden.

Bitte beachten Sie, dass ein nicht registrierter Benutzer lediglich im Forum lesen darf, während registrierte Benutzer berechtigt sind, auch im Forum zu schreiben.

Access via World Wide Web

- Query is performed interactively with the user
- Thermodynamic data and interaction coefficients

Please select an Element

H ☒																	He ☐							
Li ☐	Be ☐															B ☐	C ☐	N ☐	O ☒	F ☐	Ne ☐			
Na ☐	Mg ☐															Al ☐	Si ☐	P ☐	S ☐	Cl ☐	Ar ☐			
K ☐	Ca ☐	Ti ☐	Cr ☐	Mn ☐	Fe ☐	Co ☐	Ni ☐	Cu ☐	Zn ☐					Ge ☐	As ☐	Se ☐	Br ☐	Kr ☐						
Rb ☐	Sr ☐	Zr ☐			Tc ☐					Ag ☐	Cd ☐					Sn ☐	Sb ☐	Te ☐	I ☐	Xe ☐				
Cs ☐	Ba ☐	Ce ☐	Nd ☐	Sm ☐															Hg ☐	Tl ☐	Pb ☐	Bi ☐		
		Ra ☐	Th ☐	Pa ☐	U ☒	Np ☐	Pu ☐	Am ☐	Cm ☐															

Datacategory / Phase type

☒ Thermodynamic data ☐ gaseous phase
☐ aqueous species
☒ solid phase

☐ Interaction data

Temperature (in °C)
 from to

☒ PITZER
☐ SIT
☐ Extended Debye-Hückel

Access via World Wide Web

- Phase constituents grouped by phases and oxidation number of central element
- Thermodynamic data of pure elements
- With [Show Data] display of detailed data

SINGLE DATA QUERY

Temperature: Standard 298.15 K, Interaction model: PITZER

Elementspecific data:

Name: Uranium (U)
 Atomic number: 92
 Molar mass: 238.02891 g / mol
 Entropy: $50.2 \pm 0.2 \text{ J / (mol}^\circ\text{K)}$
 Heat capacity: $27.66 \pm 0.05 \text{ J / (mol}^\circ\text{K)}$

There are 9 species with datasets available for your selection.

☒ gas (0)
 ☒ Oxidation number none (2)

☒ aqueous (0)
 ☒ Oxidation number 4 (1)

☒ solid (9)
 ☒ Oxidation number 6 (6)

Species	Phase	Oxidation number	Number of datasets
☒ <chem>Ca(UO2)2(SiO3OH)2.5H2O(cr)</chem>	Uranophane	6	8
☒ <chem>K2(UO2)6O4(OH)6.8H2O(cr)</chem>	Compreignacite	6	8
☒ <chem>KUO2(SiO3OH).H2O(cr)</chem>	Boltwoodite	6	8
☒ <chem>Na2(UO2)2(Si2O5)3.4H2O(cr)</chem>	Na-Weeksite	6	8
☒ <chem>U(HPO4)2.4H2O(cr)</chem>	<chem>U(HPO4)2.4H2O(cr)</chem>		8
☒ <chem>(UO2)3(PO4)2.4H2O(cr)</chem>	<chem>(UO2)3(PO4)2.4H2O(cr)</chem>	6	7
☒ <chem>UO2(SO4).3H2O(cr)</chem>	<chem>UO2(SO4).3H2O(cr)</chem>		7
☒ <chem>UO3.2H2O_Schoepite(cr)</chem>	Schoepite	6	8
☒ <chem>U(OH)2(SO4)(cr)</chem>	<chem>U(OH)2(SO4)(cr)</chem>	4	8

Access via World Wide Web

- Export of data as CSV or MS-Excel[®]
- Tool-Tips with additional information (formation reaction, classification of data, references)

SINGLE DATA QUERY

Temperature: Standard 298.15 K, Interaction model: PITZER

70 dataset(s) found for your selection.

[more info in tooltips](#)

[Back](#) [Export as CSV-File](#) [Export as Excel-File](#)

Phase / Species	Datatype	Value ± Error	Unit	Data class	Data quality	Data source	Reference
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	CP298		J mol ⁻¹ K ⁻¹	6NA	6	6	NotYetPublished
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	DFG298	-6205310.658169	J mol ⁻¹	6NA	6	6	NotYetPublished
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	DFH298		J mol ⁻¹	6NA	6	6	NotYetPublished
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	DRG298	53769.755931	J mol ⁻¹	-1R	-1	-1	InternallyCalculated
Reaction $\text{Ca} < 2 + > + 2 \text{UO}_2 < 2 + > + 2 \text{Si}(\text{OH})_4 < 0 > + 5 \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \Rightarrow 6 \text{H} < + > + \text{Ca}(\text{UO}_2)_2(\text{SiO}_3\text{OH})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}(\text{cr})$							
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	DRH298						
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	DRS298		J mol ⁻¹ K ⁻¹	6NA	6	6	NotYetPublished
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	LOGK298	-9.42 ± 0.48	1	1R	1	1	GUIFAN2003 NGUISIL1992
Uranophane Ca(UO ₂) ₂ (SiO ₃ OH) ₂ ·5H ₂ O(cr)	S298		J mol ⁻¹ K ⁻¹	6NA	6	6	NotYetPublished
Compreignacite K ₂ (UO ₂) ₆ O ₄ (OH) ₆ ·8H ₂ O(cr)	CP298		J mol ⁻¹ K ⁻¹	6NA	6	6	NotYetPublished
Compreignacite K ₂ (UO ₂) ₆ O ₄ (OH) ₆ ·8H ₂ O(cr)	DFG298	-10337080.727653 ± 10956	J mol ⁻¹	-1R	-1	-1	InternallyCalculated
Compreignacite K ₂ (UO ₂) ₆ O ₄ (OH) ₆ ·8H ₂ O(cr)	DFH298		J mol ⁻¹	6NA	6	6	NotYetPublished
Compreignacite K ₂ (UO ₂) ₆ O ₄ (OH) ₆ ·8H ₂ O(cr)	DRG298	211768.359347 ± 3082	J mol ⁻¹	-1R	-1	-1	InternallyCalculated
Compreignacite K ₂ (UO ₂) ₆ O ₄ (OH) ₆ ·8H ₂ O(cr)	DRH298		J mol ⁻¹	6NA	6	6	NotYetPublished

Access via World Wide Web

Compilation of complex datasets (generic format)

The screenshot shows the THEREDA web application interface. The browser window title is "Komplexe Systeme - Windows Internet Explorer". The address bar shows the URL: http://www.thereda.de/index.php?option=com_thereda&view=komplex&Itemid=80&lang=de. The page features the THEREDA logo and a navigation menu on the left with links like "Startseite", "THEREDA Projekt", "THEREDA Partner", "THEREDA Datenabfrage", "Einzeldatenabfrage", "Vordefinierte DB", "Komplexe Systeme", "Literaturreferenzen", "Daten-Darstellung", "Downloads", "Forum", "FAQ", "Nachrichten", "Links", "Sitemap", "Suche", "Stellenangebote", and "Kontakt".

The main content area is titled "KOMPLEXE SYSTEME" and contains the following text:

Hier können Nutzer Datenabfragen für Systeme mit mehr als einem Element (außer H und O) erstellen. Dazu ist eine einmalige Registrierung (Startseite, unterster Menüpunkt in der linken Navigationsleiste) notwendig. Die Abfrage zur Erstellung selbstdefinierter Parameterdateien erfolgt schrittweise.

Am Beginn steht die Auswahl der gewünschten Elemente. Hierzu werden Wasserstoff H, Sauerstoff O und das Elektron EA (für Redoxreaktionen) stets implizit ergänzt.

Danach spezifiziert der Nutzer einen Temperaturbereich und ein Ion-Ion-Wechselwirkungsmodell.

Zuletzt wählt der Nutzer das Ausgabeformat: generisch oder für einen bestimmten Speziationscode.

Das Ergebnis der Datenbankrecherche ist eine in sich geschlossene, komplette und konsistente Datenbasis. Sie wird momentan in ASCII-Format angeboten, kann am Bildschirm angezeigt und auf den lokalen Rechner des Nutzers heruntergeladen werden.

Später wird dem Nutzer angeboten werden, sowohl die jeweils aktuellste Rechenspezifikation selbst als auch deren Ergebnis für spätere Weiterbearbeitung zu speichern (im THEREDA-Archiv). Zudem soll der Nutzer ein geochemisches Speziationsprogramm auswählen können, in dessen spezielles Eingabeformat das Ergebnis der Datenrecherche konvertiert werden kann.

Below the text is a section titled "JSON-DATEI EXPORT" with the instruction "Bitte die zu exportierenden Elemente auswählen". It features a periodic table of elements where users can select elements for export. The table includes elements from Hydrogen (H) to Oganesson (Og).

At the bottom, there is a "Wechselwirkungsmodell" (Interaction Model) dropdown menu with options: PITZER, PITZER, SIT, and EDH. The "PITZER" option is selected, and a "Herunterladen" (Download) button is visible.

Access via World Compilation of complex data

The screenshot shows the THEREDA website interface in a Windows Internet Explorer browser. The URL is http://www.thereda.de/index.php?option=com_thereda&view=komplex&Itemid=80&lang=de. The page features a sidebar with navigation links such as 'Startseite', 'THEREDA Projekt', 'THEREDA Partner', 'THEREDA Datenabfrage', 'Einzeldatenabfrage', 'Vordefinierte DB', 'Komplexe Systeme', 'Literaturreferenzen', 'Daten-Darstellung', 'Downloads', 'Forum', 'FAQ', 'Nachrichten', 'Links', 'Sitemap', 'Suche', 'Stellenangebote', and 'Kontakt'. The main content area is titled 'KOMPLEXE SYSTEME' and provides instructions on how to use the data query system. It includes a section for 'JSON-DATEN EXPORT' with a table of elements to be exported.

The JSON data export is displayed in a separate window titled 'Am-Cm-Nd.json'. It contains a large array of data points, each represented as a JSON object. The objects include fields for 'interactiontype', 'pcon_1', 'pcon_2', 'pcon_3', 'description', and various 'ip' (interaction parameter) values. The data is organized into a structured format, likely representing a complex system or reaction network.

Below the JSON data, there is a section for 'Wechselwirkungsmodell' (Interaction Model) with a dropdown menu showing 'PITZER' and 'SIT' options. A 'Laden' button is visible next to the dropdown.

At the bottom of the page, a footer message reads: 'Um Hilfe zu erhalten drücken Sie F1'.

Access via World Wide Web

Compilation of complex datasets (parameter files)

- Storage of md5-checksum of all downloaded parameter files
- Benchmark calculations are documented, archived and made accessible to the user

Access via World Wide Web

Compilation of complex datasets (parameter files)

THEREDA - Parameterdatei Export - Windows Internet Explorer

http://www.thereda.de/thereda-output/paramFile.do

Favoriten THEREDA - Parameterdatei Export

PARAMETERDATEI EXPORT

Bitte die zu exportierenden Elemente auswählen

H ☒																He ☐	
Li ☐	Be ☐																
Na ☒	Mg ☒																
K ☒	Ca ☒	Ti ☐			Cr ☐	Mn ☐	Fe ☐	Co ☐	Ni ☐	Cu ☐	Zn ☐		Ge ☐	As ☐	Se ☒	Br ☒	Kr ☐
Rb ☐	Sr ☐	Zr ☐				Tc ☐				Ag ☐	Cd ☐		Sn ☐	Sb ☐	Te ☐	I ☐	Xe ☐
Cs ☐	Ba ☐	Ce ☐	Nd ☐	Sm ☐									Hg ☐	Tl ☐	Pb ☐	Bi ☐	
	Ra ☐	Th ☐	Pa ☐	U ☐	Np ☐	Pu ☐	Am ☐	Cm ☒									

Zielcode

ChemApp Export ▾

ChemApp Exporter

EQ3/6-Exporter

GWB

JSON Exporter

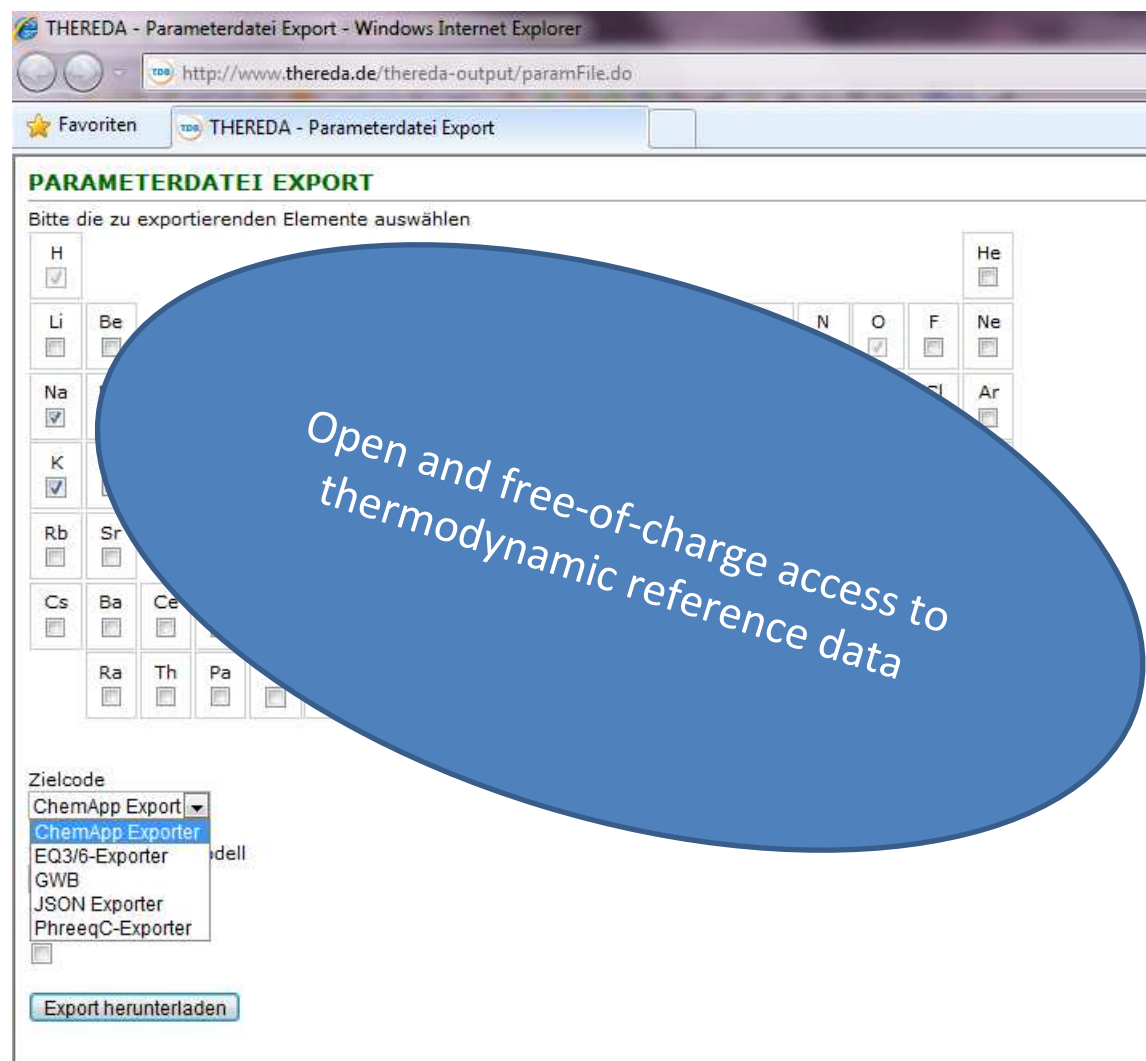
PhreeqC-Exporter

☐

Export herunterladen

Access via World Wide Web

Compilation of complex datasets (parameter files)



Additional element
of quality
assurance:
feedback from the
user



Startseite → Forum



Freitag, 11. Juni 2010 

Startseite

THEREDA Projekt

THEREDA Partner

THEREDA Datenabfrage

Daten-Darstellung

Downloads

Forum →

FAQ

Nachrichten

Links

Sitemap

Suche

Stellenangebote

Kontakt

Wir haben 3 Gäste und 1 Mitglied online

Aktuelle Beiträge Kategorien Regeln
Im Forum suchen

Willkommen, Besucher
 Bitte [anmelden](#) oder [registrieren](#). [Passwort vergessen?](#)

 **THEREDA**
 (1 Leser) (1) Besucher

Wählen Sie ein Forum

Stoffliche Systeme
 Hier werden stoffliche Systeme diskutiert.

Forum	Themen	Antw.	Letzter Eintrag
 Salze, ozeanische Salze Moderation: Wolfgang Voigt	0	0	Keine Beiträge
 Actiniden Moderation: Christian Marquardt	0	0	Keine Beiträge
 Zement Moderation: Stefan Wilhelm	0	0	Keine Beiträge
 Uran, Radium Moderation: Vinzenz Brendler	0	0	Keine Beiträge
 Cäsium, Rubidium, Strontium Moderation: Tina Scharge	0	0	Keine Beiträge

WWW-Präsenz

Forum	Themen	Antw.	Letzter Eintrag
 Allgemeines	0	0	Keine Beiträge
 Datenabfragen Moderation: Vinzenz Brendler	0	0	Keine Beiträge
 Code-spezifische Formate Moderation: Helge Moog	0	0	Keine Beiträge
 JSON & Parser-Entwicklung Moderation: Helge Moog	0	0	Keine Beiträge

Daten & Qualitätssicherung

Forum	Themen	Antw.	Letzter Eintrag

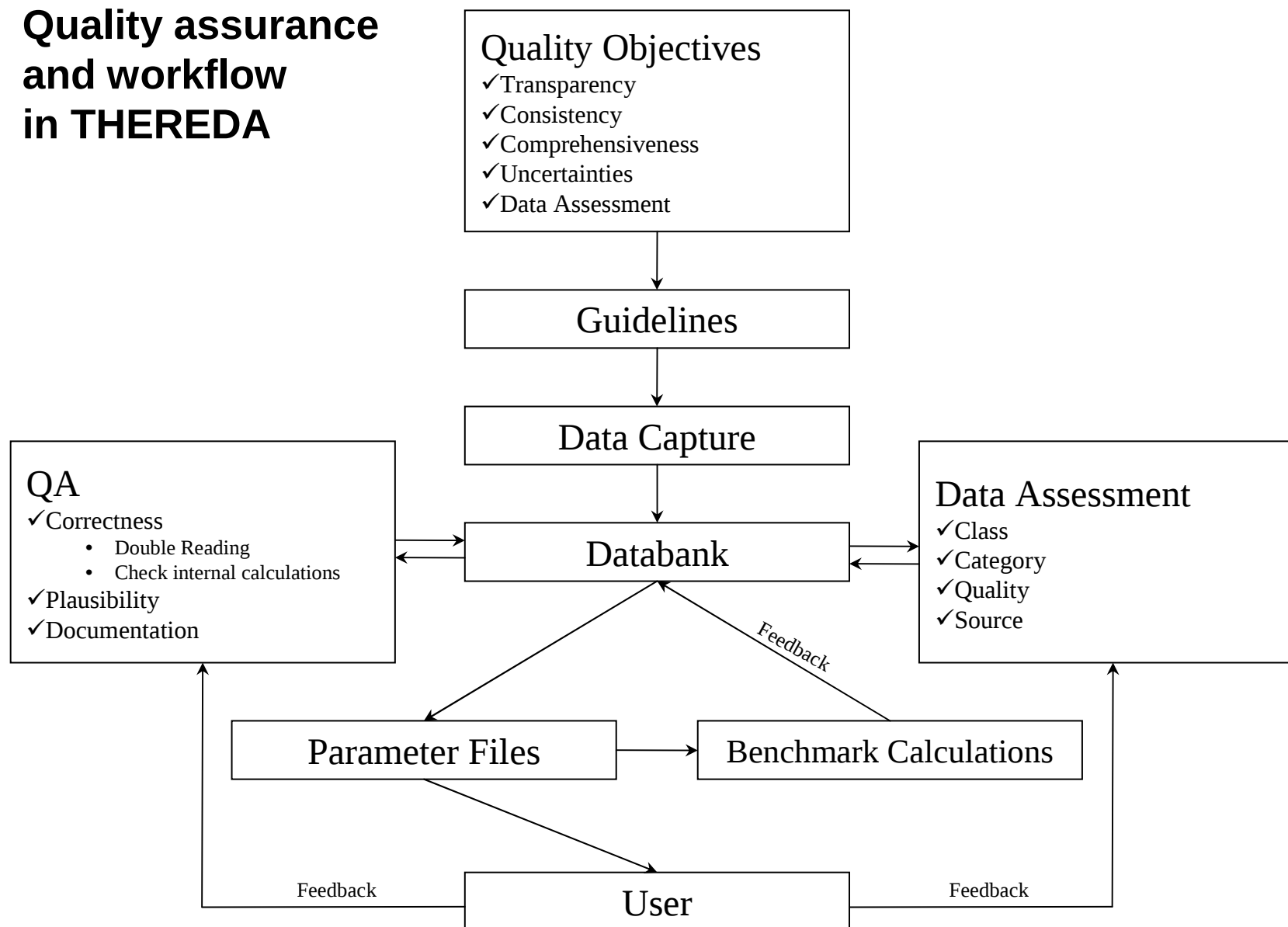
 Internet | Geschützt

Comprehensiveness (in part)

Umfang

- 196 Phases
- 312 aq. Species (incl. 34 Primary Master)
- 336 formation reactions
- 789 Standard data sets (Pitzer)
- 717 interactions (Pitzer and SIT)

Quality assurance and workflow in THEREDA



Current activities

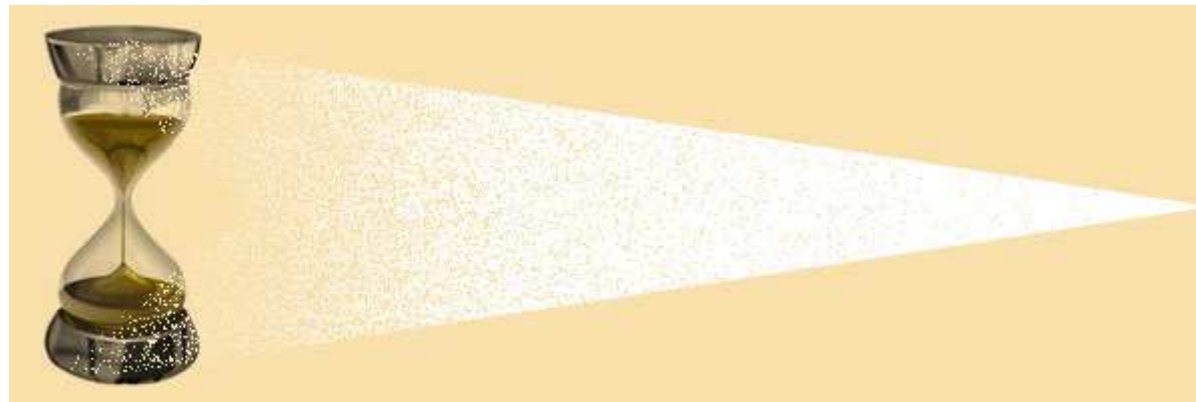
- Preparation of first release of data for
 - System of oceanic salts (for some subsystems up to 300°C)
 - Am, Cm, Nd
- Completion (and test!) of export programs for
 - Geochemist's Workbench (GWB)
 - CHEMAPP
 - EQ3/6
 - PHREEQC
- Execution and documentation of benchmark calculations

Planned activities in the near future

- Planning for web-based user interface (primarily intended for editors)
- Implementation of an internal review (to be tested with the first data to be released)
- Preparation of the integration of sorption data
- Release of data for Np und Pu planned ~ Sommer 2011

Long-term useability

- Useage of open-source programs
- Low degree of abstraction of the data model
- Documentation of databank structure
- Flexible databank structure
- Joint project of five research institutions



Conclusion

- THEREDA offers a web-based, state-of-the-art thermodynamic reference database for aqueous systems in equilibrium with nuclear or non-nuclear waste forms in Germany
- Joint-project of five research institutions
- Comprehensive range of data
- Access to code-specific parameter files
- Means of directing future research and of quality assurance for government agencies, service provider, and research institutions
- Future extensions of the thermodynamic database for nuclear and non-nuclear waste forms in Germany in conjunction with THEREDA

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!