



## THEREDA – Thermodynamic Reference Database

Helge C. Moog<sup>1</sup>, Tina Scharge<sup>1</sup>, Holger Seher<sup>1</sup>, Frank Bok<sup>2</sup>, Vinzenz Brendler<sup>2</sup>, Anke Richter<sup>2</sup>, Laurin Wissmeier<sup>3</sup>, Marcus Altmaier<sup>4</sup>, Xavier Gaona<sup>4</sup>, Nese Cevirim-Papaioannou<sup>4</sup>, Daniela Freyer<sup>5</sup>, Melanie Pannach<sup>5</sup>, Julia Sohr<sup>5</sup>, and Wolfgang Voigt<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, Braunschweig,  
Theodor-Heuss-Straße 4, 38122 Braunschweig, Germany

<sup>2</sup>Institute of Resource Ecology, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf,  
Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden, Germany

<sup>3</sup>CSD Engineers AG, Schachenallee 29A, 5000 Aarau, Switzerland

<sup>4</sup>Institute for Nuclear Waste Disposal, Karlsruher Institut für Technologie,  
P.O. Box 3640, 76021 Karlsruhe, Germany

<sup>5</sup>Institute for Inorganic Chemistry, Technische Univ. Bergakademie Freiberg,  
Leipziger Straße 29, 09596 Freiberg, Germany

**Correspondence:** Helge C. Moog (helge.moog@grs.de)

Published: 10 November 2021

**Abstract.** Part of the process to ensure the safety of radioactive waste disposal is the predictive modeling of the solubility of all relevant toxic components in a complex aqueous solution. To ensure the reliability of thermodynamic equilibrium modeling as well as to facilitate the comparison of such calculations done by different institutions, it is necessary to create a mutually accepted thermodynamic reference database. To meet this demand several institutions in Germany joined efforts and created THEREDA (Moog et al., 2015).

THEREDA is a suite of programs at the base of which resides a relational databank. Special emphasis is put on thermodynamic data along with suitable Pitzer coefficients, which enable the calculation of solubilities in high-saline solutions. Registered users may either download single thermodynamic data or ready-to-use parameter files for the geochemical speciation codes PHREEQC, Geochemist's Workbench, CHEMAPP, or TOUGHREACT. Data can also be downloaded in a generic JSON format to enable the import into other codes. The database can be accessed via the world wide web: <http://www.thereda.de> (last access: 1 November 2021).

Prior to release, the released part of the database is subjected to many tests. Results are compared to results from earlier releases and among the different codes. This is to ensure that by additions of new and modification of existing data no adverse side effects on calculations are caused. Furthermore, our website offers an increasing number of examples for applications, including graphical representation, which can be filtered by components of the calculated system.

**Kurzfassung.** Teil des Prozesses zur Gewährleistung der Sicherheit der Entsorgung radioaktiver Abfälle ist die vorausschauende Modellierung der Löslichkeit aller relevanten toxischen Komponenten in einer komplexen wässrigen Lösung. Um die Zuverlässigkeit der thermodynamischen Gleichgewichtsmodellierung sicherzustellen und den Vergleich solcher Berechnungen verschiedener Institutionen zu erleichtern, ist es notwendig, eine allgemein akzeptierte thermodynamische Referenzdatenbank zu schaffen. Um diese Anforderung zu erfüllen, haben sich mehrere Institutionen in Deutschland zusammengeschlossen und THEREDA ins Leben gerufen (Moog et al., 2015).

THEREDA setzt sich aus einer Reihe von Programmen zusammen, die auf eine relationale Datenbank zugreifen. Ein besonderer Schwerpunkt liegt auf thermodynamischen Daten sowie geeigneten Pitzer-Koeffizienten, welche die Berechnung von Löslichkeiten in hochsalinaren Lösungen ermöglichen. Registrierte Anwender können entweder einzelne thermodynamische Daten oder gebrauchsfertige Parameterdateien für die geochemischen Speziationcodes PHREEQC, Geochemist's Workbench, CHEMAPP oder TOUGHREACT herunterladen. Die

Daten können auch in einem generischen JSON-Format heruntergeladen werden, um den Import in andere Codes zu ermöglichen. Der Zugriff auf die Datenbank ist über das World Wide Web möglich: <http://www.thereda.de> (letzter Zugriff: 1. November 2021).

Vor der Freigabe wird der freigegebene Teil der Datenbank zahlreichen Tests unterzogen. Die Ergebnisse werden mit den Ergebnissen früherer Freigaben und zwischen den verschiedenen Codes verglichen. Damit soll sichergestellt werden, dass durch die Hinzufügung neuer und die Änderung bestehender Daten keine nachteiligen Auswirkungen auf die Berechnungen verursacht werden. Darüber hinaus bietet unsere Website eine wachsende Zahl von Anwendungsbeispielen, einschließlich grafischer Darstellungen, die nach Komponenten des berechneten Systems gefiltert werden können.

**Financial support.** This research has been supported by the Federal Company for Radioactive Waste Disposal (BGE).

## References

Moog, H. C., Bok, F., Marquardt, C. M., and Brendler, V.: Disposal of Nuclear Waste in Host Rock formations featuring high-saline solutions – Implementation of a Thermodynamic Reference Database (THEREDA), *Appl. Geochem.*, 55, 72–84, <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2014.12.016>, 2015.