

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung und Überblick 1

1.1 Problemstellung 1

1.2 Allgemeines..... 2

1.2.1 Endlagerkonzept Gorleben 2

1.2.2 CO₂-Transportmodellierung 4

1.2.3 Geochemische Rechencodes 5

1.2.4 Thermodynamische Datenbasen 5

2 Methodik 7

2.1 Grundlagen 7

2.1.1 Wechselwirkungen in Lösungen 7

2.1.2 Thermodynamik von Reaktionen 8

2.1.3 Kohlensäure-Gleichgewicht 9

2.1.4 Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht 10

2.1.5 Sättigungsindex..... 10

2.1.6 Ideales Gasgesetz 11

2.1.7 Henry-Gesetz 12

2.1.8 Advektion 12

2.1.9 Diffusion 13

2.2 PHREEQC 14

2.2.1 Eingabedatei 15

2.2.2 Thermodynamische Datenbasis..... 15

2.2.3 Numerisches Lösungsverfahren 16

2.2.4 Ausgabedatei 17

2.3 PHREEQC-Modellierung auf GRS-Rechencluster..... 17

2.4 Post-processing mit MATLAB 18

3 Konzeptionelles Modell am Beispiel Gorleben..... 19

3.1 Geometrie 19

3.2 Lösungsangebot und -zusammensetzung 22

3.3 Gasbildung bei Korrosion der Behälter und der radioaktiven Abfälle..... 24

3.4	Transportmodellierung und -prozesse	26
4	Numerische Simulation mit PHREEQC	29
4.1	Programmtechnische Randbedingungen	29
4.2	Geochemische Zusammensetzung der initialen Lösungen.....	30
4.3	Initiale Verteilung durch Diffusion.....	31
4.4	Lösungstransport durch Advektion.....	32
4.5	Realisierung eines konstanten Massenstroms.....	33
5	Ergebnisse der Modellierungen.....	35
5.1	Verteilung der Lösungsspezies durch Diffusion	35
5.2	Lösungstransport durch Advektion.....	37
5.2.1	CO ₂	37
5.2.2	Aquatische C-Spezies	42
5.2.3	Sättigungsindizes ausgewählter Mineralphasen	46
5.2.4	Bildung von Magnesit.....	48
5.2.5	Isotopenaustausch mit ¹⁴ C	51
5.3	Parametervariationen	55
5.3.1	CO ₂ -Partialdruck bis 1 bar.....	55
5.3.2	CO ₂ -Partialdruck über 1 bar.....	59
5.3.3	Calcium	62
5.3.4	Eisen	66
5.3.5	Kalium	67
6	Diskussion und Schlussfolgerungen.....	69
6.1	Aquatische Species.....	69
6.1.1	Schlussfolgerung für die Transportmodellierung.....	71
6.2	Weitere Faktoren.....	72
6.2.1	CO ₂ -Partialdruck	72
6.2.2	Calcium	72
6.2.3	Eisen	75
6.2.4	Kalium	75
6.2.5	Temperatur.....	75

6.3	Einsatz von PHREEQC zur Transportmodellierung	77
7	Zusammenfassung	79
8	Literaturverzeichnis	81
	Abbildungsverzeichnis	89
	Tabellenverzeichnis	93
	Formelzeichenverzeichnis	95
	Abkürzungsverzeichnis	97
	Verwendete Software	99