

**Název práce: Difúze vybraných aniontů kompakovaným bentonitem**

Autor: Tomáš Rosendorf

Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: doc. Mgr. Dušan Vopálka, CSc.

Konzultantka: Ing. Eva Hofmanová

Abstrakt

Práce se zabývá problematikou difúzního transportu chloru v prostředí kompakovaného bentonitu, těsnícího / výplňového materiálu pro hlubinné ukládání vysoce radioaktivního odpadu. V difúzních celách byly provedeny difúzní experimenty průnikového typu dvou stabilních specií chlóru - chloridu ve dvou sériích (neaktivní chlorid a chlorid ve formě ^{36}Cl) a chloristanu v pracovním elektrolytu (dusičnanu sodném) o iontové síle $0,1 \text{ mol}\cdot\text{dm}^{-3}$ v kompakovaném bentonitu B75 při objemové hustotě $1600 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Při uvažování nulové sorpce, byly stanoveny charakteristické veličiny pro difúzi - zdánlivý a efektivní difúzní koeficient s užitím standardní vyhodnocovací metody *time-lag* a pomocí modulu Evaldiff v programovém prostředí Goldsim, implementujícím vlastnosti použitého typu difúzní cely a kompakovaného bentonitu.

Byly určeny charakteristiky bentonitu B75 - přirozená vlhkost $w = (6,7 \pm 0,2) \%$ a specifická hustota $\rho_b = (2,86 \pm 0,06) \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$. Difúzní experimenty s neaktivním chloridem byly silně ovlivněny vyluhováním chloridu při kontaktu bentonitu s pracovními roztoky. Prokázal se předpoklad o aniontové exkluzi: stanovené hodnoty efektivní porozity byly přibližně pětinašobně nižší než hodnoty celkové porozity. Výsledné hodnoty difúzních koeficientů pro chlorid [zdánlivý difúzní koeficient $D_a = (1,64 \pm 0,10)\times 10^{-10} \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ a efektivní difúzní koeficient $D_e = (1,30 \pm 0,07)\times 10^{-11} \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-1}$] byly ve velmi dobré shodě s údaji jiných autorů pro podobné systémy. Pro chloristan byly zjištěny nižší hodnoty charakteristických difúzních koeficientů [$D_a = (1,14 \pm 0,10)\times 10^{-10} \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-1}$, $D_e = (0,88 \pm 0,03)\times 10^{-11} \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-1}$].

Při rozboru výsledků difúzních experimentů byl navržen a ověřen inovativní jednoduchý způsob stanovení efektivní porozity z koncentračního profilu ve vrstvě bentonitu po skončení experimentu vedeného do ustáleného stavu.

Klíčová slova: difúze, chlór, bentonit, Evaldiff, průniková křivka

**Abstract**

The work deals with diffusion transport of chlorine through compacted bentonite - buffer / backfill material for high-level radioactive waste repository. In diffusion cells were made through diffusion experiments of two stable chlorine species - chloride in two series (inactive chloride and radioactive ^{36}Cl) and perchlorate in the ionic medium (sodium nitrate) with ionic strength of $0.1 \text{ mol}\cdot\text{dm}^{-3}$ through compacted bentonite B75 with dry density of $1600 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Considering no sorption, characteristic values for diffusion – an apparent and effective diffusion coefficients were determined with the application of a standard time-lag evaluation method and by using the module Evaldiff prepared in the GoldSim environment. In the module were implemented properties of the diffusion cell with compacted bentonite used in experiments.

Characteristics of bentonite - natural humidity $w = (6.7 \pm 0.2) \%$ and specific density $\rho_b = (2.86 \pm 0.06) \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ were determined. Diffusion experiments of inactive chloride were strongly influenced by the composition of bentonite as a result of leaching chloride from it. Values of effective porosity determined were approximately five time lower than values of total porosity, which confirms the effect of anion exclusion in compacted bentonite. Obtained results of parameters the diffusion of chloride [the apparent $D_a = (1.64 \pm 0.10) \times 10^{-10} \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ diffusion coefficient and the effective $D_e = (1.30 \pm 0.07) \times 10^{-11} \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ diffusion coefficient] were in good agreement with data of several authors. Determined diffusion coefficients of perchlorate were lower [$D_a = (1.14 \pm 0.10) \times 10^{-10} \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-1}$, $D_e = (0.88 \pm 0.03) \times 10^{-11} \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-1}$].

In discussion of results of diffusion experiments was derived and verified an inovative simply way for the determination of effective porosity, in which the knowledge of concentration profile in the bentonite layer in the steady state was used.

Keywords: diffusion, chlorine, bentonite, Evaldiff, breakthrough curve
