

*Názov práce:* Simulácia transportu rádioaktívnych kontaminantov v bariérach úložísk s použitím geochemického kódu PHREEQC

*Autor:* Zuzana Šimúthová

*Obor:* Jaderně chemické inženýrství

*Druh práce:* Bakalárska práce

*Vedúci práce:* doc. Mgr. Dušan Vopálka, CSc.

*Abstrakt:* Práca sa zaoberá problematikou tvorby numerických modelov transportu s použitím geochemického kódu PHREEQC. V teoretickej časti je podstatná časť rešerše venovaná aktivitám vedeckého pracoviska KIT INE, ďalej je tu rozoberané využitie geochemického kódu PHREEQC pri modelovaní migračných procesov v životnom prostredí vo svete a priamo na Katedre jaderné chemie, FJFI ČVUT v Prahe. Experimentálna časť, ktorá spočíva v modelovaní pomocou kódu PHREEQC je rozdelená na štyri samostatné úlohy. Prvé tri obsahujú parametrické štúdie rôznych numerických modelov difúznych experimentov a vo štvrtnej úlohe sú ukážky modelov konkrétnych reálnych difúznych experimentov so stronciom a bentonitom. V závere sú vytvorené modely kriticky zhodnotené a tiež sú tu uvedené návrhy na ďalší možný rozvoj v danej oblasti.

*Kľúčové slová:* difúzny transport, numerické modelovanie, PRHEEQC, stroncium, bentonit

*Title:* Simulation of reactive transport of radioactive contaminants in barriers of waste disposals with use of geochemical modeling code PHREEQC

*Abstract:* This work deals with creating of numerical models of reactive transport contaminants with use of geochemical modeling code PHREEQC. The theoretical part consists of complex study of activities of KIT INE and exploitation of geochemical modeling code PHREEQC in modeling of migration process in the environment in the world and on The Department of Nuclear Chemistry, FNSPE CTU in Prague. The experimental part is divided into four independent tasks. Three of them stand for parametrical studies of different numerical models of diffusion experiments and the fourth consists of examples of concrete real diffusions experiments with strontium and bentonite. In the end, prepared numerical models were critically reviewed and also new ideas for development were proposed.

*Key words:* diffusion transport, numerical modeling, PHREEQC, strontium, bentonite