

Technická zpráva číslo 102/2017

**ODHAD HODNOT
TRANSPORTNÍCH
CHARAKTERISTIK
KRYSTALINICKÝCH HORNIN
ČESKÉHO MASIVU**

Václava Havlová
a kolektiv

ÚJV Řež, a. s.
Praha, leden 2017

ODHAD HODNOT TRANSPORTNÍCH CHARAKTERISTIK KRYSTALINICKÝCH HORNIN ČESKÉHO MASIVU

ŘEŠITELÉ:

ÚJV Řež, a. s.¹, ČGS²

Autoři: Václava Havlová¹, Kateřina Kolomá¹, Lukáš Brázda¹, Lenka Rukavičková²



Obsah

1	Úvod	9
2	Základní soubor relevantních radionuklidů	11
3	Uvažované transportní parametry	12
4	Sorpce radionuklidů na granitické horniny	14
4.1	Aktivační produkty	14
4.1.1	Be	14
4.1.2	C	15
4.1.3	Cl	15
4.1.4	Ni	15
4.1.5	Zr	16
4.1.6	Mo	16
4.1.7	Nb	17
4.1.8	Ag	17
4.1.9	Ho	17
4.2	Štěpné produkty	18
4.2.1	Se	18
4.2.2	Sr	19
4.2.3	Tc	19
4.2.4	Pd	20
4.2.5	Sn	21
4.2.6	I	21
4.2.7	Cs	22
4.2.8	Sm	22
4.3	Aktinidy	23
4.3.1	Th	23
4.3.2	Pa	23
4.3.3	U	24
4.3.4	Pu	25
4.3.5	Np	25
4.3.6	Am	26

Dlážděná 6 | 110 00 Praha 1 | ČR

tel.: +420 221 421 511 | fax: +420 221 421 544 | e-mail: info@sura0.cz | www.sura0.cz

IČ: 66000769 | Bankovní spojení: ČNB Praha 1, č. ú. 35-64726011/0710

Tato zpráva je výhradně majetkem SÚRAO a její šíření bez vědomí majitele je zakázáno.

Správa úložišť radioaktivních odpadů byla zřízena k 1. 6. 1997 Ministerstvem průmyslu a obchodu ČR jako státní organizace na základě atomového zákona (§ 26 zákona č. 18/1997 Sb. o mírovém využívání jaderné energie a ionizujícího záření). Od roku 2000 je SÚRAO ve smyslu § 51 zákona č. 219/2000 Sb. organizační složkou státu.

4.3.7	Cm	26
4.4	Shrnutí	27
5	Difúze radionuklidů v horninovém prostředí granitů	28
6	Vlastnosti horniny, ovlivňující transport radionuklidů	32
6.1	Porozita ε	32
6.2	Hustota hornin ρ	33
6.3	Vyhodnocení hodnot formačního faktoru F_f pro horniny Českého masivu.....	34
6.4	Vzdálenost, do níž je hornina v rovnováze s podzemní vodou v puklině δ	34
6.5	Rozevření (apertura) pukliny a	34
6.6	Flow wetted surface (smáčený povrch)	35
6.7	Složení vod v horninovém masivu granitických hornin.....	35
7	Závěr	39
8	Literatura	40

Seznam obrázků:

Obr. 1	Zobecněný konceptuální model pukliny pro lokalitu Olkiluoto (Posiva Oy, 2012)	30
Obr. 2	Realizace úseku transportní cesty. Jednotlivým segmentům jsou přiřazeny transportní třídy dle určených pravděpodobností. Lokální transportní třídy se podél transportních cest mohou měnit (Posiva Oy, 2012)	31
Obr. 3	Schéma relací pórovitosti intruziv a granulitů podle průzkumných lokalit HÚ (aritmetický průměr $\pm 1/2$ směrodatná odchylka); Hanák (2015).....	33
Obr. 4	Piperův diagram složení podzemních vod podle Tab. 6.....	37

Dlážděná 6 | 110 00 Praha 1 | ČR

tel.: +420 221 421 511 | fax: +420 221 421 544 | e-mail: info@sura0.cz | www.sura0.cz

IČ: 66000769 | Bankovní spojení: ČNB Praha 1, č. ú. 35-64726011/0710

Tato zpráva je výhradně majetkem SÚRAO a její šíření bez vědomí majitele je zakázáno.

Správa úložišť radioaktivních odpadů byla zřízena k 1. 6. 1997 Ministerstvem průmyslu a obchodu ČR jako státní organizace na základě atomového zákona (§ 26 zákona č. 18/1997 Sb. o mírovém využívání jaderné energie a ionizujícího záření). Od roku 2000 je SÚRAO ve smyslu § 51 zákona č. 219/2000 Sb. organizační složkou státu.

Seznam tabulek:

Tab. 1 Soubor relevantní radionuklidů pro hodnocení bezpečnosti HÚ (SÚRAO).....	11
Tab. 2 Doporučené hodnoty sorpčních koeficientů K_d pro relevantní radionuklidy dle expertního výběru, popsaného v části 8.4	27
Tab. 3 Navržený soubor realistických a konzervativních efektivních difúzních koeficientů D_e ($m^2 s^{-1}$). Jejich hodnota byla vypočtena na základě postupu, uvedeného ve Skagius a Neretnieks (1997), a předpokládané hodnotě $D_e(HTO)$ $3,1 \cdot 10^{-13} m^2 s^{-1}$ pro průměrnou hodnotu porozity hornin ČM 0,4 % (Havlová et al., 2015; experimentální program). Hodnoty konzervativních D_e byly získány za předpokladu $0,1 \cdot D_e(\text{realistické})$	29
Tab. 4 Hodnoty efektivních difúzních koeficientů pro jednotlivé transportní třídy a jejich konstituenty (Posiva Oy 2013).....	31
Tab. 5 Výsledky t-testu vzájemné odlišnosti aritmetických průměrů (%) intruzív + granulitů u Stříteže, mineralogická hustota (Hanák, 2016). AM = aritmetický průměr.....	33
Tab. 6 Základní chemické složení podzemních vod 1) Melechovský masiv – průměr, příprava SGW (Buňatová et al., 1995), 2) Lokalita Háje u Příbrami, podzemní zásobník plynu, vývěr P-6, roky 1990-1996 – průměr, 3) Český masiv - medián (Rukavičková et al., 2009), 4) Český masiv, minerální vody - medián (Rukavičková et al., 2009), 5) Český masiv, fosilní vody - medián (Rukavičková et al., 2009), 6) Jáchymov, pramen Běhounek, vrt HG-1, 7) Lokalita Čertovka, vrt TIV-1 (Havlová et al., 2015), 8) Lokalita Magdaléna, vrt N-2 (Havlová et al., 2015), 9) Lokalita Horka, vrt NT-2 (Havlová et al., 2015), 10) Lokalita Čihadlo, vrt DE-2 (Havlová et al., 2015), 11) Lokalita Březový potok, vrt HV-5 (Havlová et al., 2015), 12) Lokalita Hrádek, vrt DC-1 (Havlová et al., 2015), 13) Lokalita Kraví Hora, vrt S-1, PVP Bukov (Havlová et al. 2015), 14) PVP Bukov (600 m) – průměr, příprava SGW2 , 15) Důl Rožná (1000 m) – průměr, příprava SGW3	36
Tab. 7 Navržené chemické složení podzemní vody SGW2 a SGW3 na základě reálných analýz podzemních vod z PVP Bukov a dolu Rožná	38

Seznam textových příloh:

Seznam elektronických příloh:

Příloha 1 2016 PB 003 Transport 1 Data Difuze.xls

Příloha 2 Odvození D_e Ohlson Neretnieks 1997.xls

Dlážděná 6 | 110 00 Praha 1 | ČR

tel.: +420 221 421 511 | fax: +420 221 421 544 | e-mail: info@sura0.cz | www.sura0.cz

IČ: 66000769 | Bankovní spojení: ČNB Praha 1, č. ú. 35-64726011/0710

Tato zpráva je výhradně majetkem SÚRAO a její šíření bez vědomí majitele je zakázáno.

Správa úložišť radioaktivních odpadů byla zřízena k 1. 6. 1997 Ministerstvem průmyslu a obchodu ČR jako státní organizace na základě atomového zákona (§ 26 zákona č. 18/1997 Sb. o mírovém využívání jaderné energie a ionizujícího záření). Od roku 2000 je SÚRAO ve smyslu § 51 zákona č. 219/2000 Sb. organizační složkou státu.

Seznam použitých zkratk:

CEC	kationtově výměnná kapacita
ČGS	Česká geologická služba
ČR	Česká republika
HTO	tritiovaná voda
HÚ	hlubinné úložiště
PÚ	průzkumné území
SW	software
SKB	Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Company
RAO	radioaktivní odpad
TDS	celková salinita
TD	through-diffusion experiment (průnikový difúzní experiment)
TEM	through-electromigration experiment (průnikový elektromigrační experiment)
UOS	ukládací obalový soubor
VAO	vysoce aktivní odpady
VJP	vyhořelé jaderné palivo
ZL	zadávací list

Abstrakt

V této zprávě jsou metodou expertního výběru navrženy hodnoty migračních parametrů pro hodnoty sorpčního koeficientu K_d a efektivního difúzního koeficientu D_e pro relevantní radionuklidy v prostředí podzemních vod Českého masivu, dále hodnoty porozity pro granitické horniny Českého masivu, hustotu hornin a vyhodnocení generelního složení podzemních vod v Českém masivu. Hodnoty sorpčních koeficientů byly vyhodnoceny jednak na základě literárních dat, jednak na základě výsledků experimentálního programu pro horniny potenciálních lokalit. Obdobným způsobem byly vyhodnoceny i hodnoty D_e . Doporučené hodnoty porozity, hustoty hornin a složení podzemních vod vycházejí z reálných hodnot naměřených pro prostředí hornin a podzemních vod Českého masivu.

Klíčová slova

úložiště, radioaktivní odpady, migrace, sorpce, difúze, porozita, podzemní voda, hodnocení bezpečnosti

Summary

In the report transport parameter values are proposed based on the expert judgement. The proposed values are following: sorption coefficient K_d , effective diffusion coefficient D_e , both for relevant radionuclides and crystalline rock environment in Czech massive. Furthermore, values for porosity, rock density and groundwater chemistry values are proposed. K_d and D_e values were evaluated, concerning both literature values and experimental programme results, using samples from potential DGR sites. Recommended values for porosity, rock density and groundwater composition were based on real values, measured for Bohemian Massive rock and groundwater samples.

Keywords

repository, radioactive waste, migration, sorption, diffusion, porosity, ground water, safety assessment

1 Úvod

Tato zpráva byla zpracována v rámci projektu SÚRAO „Výzkumná podpora bezpečnostního hodnocení hlubinného úložiště“, který je součástí přípravy hlubinného úložiště radioaktivních odpadů (dále jen HÚ). Cílem projektu je získat vybraná data, modely, argumenty a další informace potřebné pro zhodnocení potenciálních lokalit pro umístění HÚ z hlediska dlouhodobé bezpečnosti. Na základě veřejného zadávacího řízení byla v červenci 2014 uzavřena čtyřletá smlouva s ÚJV Řež, a. s. a jeho subdodavateli: Českou geologickou službou, ČVUT v Praze, Technickou univerzitou v Liberci, Ústavem Geoniky AV ČR, a společnostmi Arcadis CZ a. s., PROGEO, s.r.o. a Chemcomex Praha, a. s. a Centrum výzkumu Řež, s.r.o. o poskytování výzkumné podpory hodnocení dlouhodobé bezpečnosti v následujících oblastech:

- (i) Chování VJP a forem RAO, nepřijatelných do přípovrchových úložišť, v prostředí HÚ;
- (ii) Chování ukládacích obalových souborů (UOS) VJP a RAO v prostředí HÚ;
- (iii) Chování tlumicích, výplňových a dalších konstrukčních materiálů v prostředí HÚ;
- (iv) Řešení úložných vrtů a jejich vliv na vlastnosti obklopujícího horninového prostředí;
- (v) Chování horninového prostředí;
- (vi) Transport radionuklidů z úložiště;
- (vii) Další charakteristiky lokalit potenciálně ovlivňující bezpečnost úložiště.

Cílem plnění dílčího projektu "Vstupní parametry a procesní modely pro hodnocení transportu radionuklidů přes horninové prostředí" (oblast Transport radionuklidů z úložiště) je získat vstupní parametry a procesní modely pro hodnocení transportu radionuklidů přes horninové prostředí pro podporu pracovníků Objednatele v souladu s výše uvedenou oblastí (vi) Transport radionuklidů z úložiště.

Předmětem řešení tohoto dílčího projektu je:

- Shrnutí a analýza transportních procesů, modelů a výpočetních kódů pro určení transportních cest a hodnocení transportu radionuklidů přes horninové prostředí.
- Výběr vhodných procesních modelů pro popis transportu radionuklidů v krystalinickém prostředí a určení transportních cest na kandidátních lokalitách v návaznosti na přípravu 3D strukturně-geologických a hydrogeologických modelů v dílčích projektech, aktualizace analýz zahraničních poznatků a určení transportních cest pro vybrané lokality podle požadavků SÚRAO.
- Shrnutí a aktualizace odhadu transportních parametrů horninových prostředí pro vybrané lokality podle požadavků Objednatele ve formě databáze parametrů včetně odhadu jejich nejistot na základě analýzy dosavadních poznatků dosažených při přípravě HÚ v ČR a aktualizace analýz zahraničních poznatků.
- Ověření vybraných modelů a implementace výpočetních kódů pro určení transportních cest v potenciálních lokalitách.
- Ověření a srovnání transportních charakteristik dostupných vzorků z různých horninových prostředí uvažovaných pro HÚ v ČR.

Celková náplň projektu, tj. shromáždění, vyhodnocení a případně výpočet hodnot transportních parametrů radionuklidů pro podmínky horninových masivů ČR potenciálně uvažovaných pro umístění HÚ, je pro svou rozsáhlost realizována v několika dílčích zprávách. Koncept těchto dílčích zpráv popisujících odhad transportních parametrů je následující:

- Zpráva 1a – Výpočet rozpustnosti radionuklidů v podmínkách podzemních vod Českého masivu
- Zpráva 1b – Odhad hodnot transportních charakteristik krystalinických hornin Českého masivu

Dílčí zpráva „Výpočet rozpustnosti radionuklidů v podmínkách podzemních vod Českého masivu“ se zabývá výpočetním určením specií a rozpustností radionuklidů, relevantních pro hodnocení bezpečnosti HÚ v ČR v podmínkách složení podzemních vod granitických masivů v ČR v přibližné hloubce 600 m. Tyto rozpustnosti, odhadnuté na základě rovnovážně termodynamických výpočtů, tedy odpovídají poli vzdálených interakcí (geologickému prostředí).

Tato zpráva "Odhad hodnot transportních charakteristik krystalinických hornin Českého masivu" se zaměřuje na shrnutí a aktualizace hodnot transportních parametrů horninových prostředí pro vybrané lokality včetně odhadu jejich nejistot, a to na základě analýzy dosavadních poznatků dosažených při přípravě HÚ v ČR a aktualizace analýz zahraničních poznatků.

2 Základní soubor relevantních radionuklidů

Základní soubor relevantní radionuklidů vychází ze zadání Objednatele a z předchozích prací, jako je např. Aktualizace referenčního projektu 2011. Relevantní radionuklidy jsou shrnuty v Tab. 1.

Tab. 1 Soubor relevantní radionuklidů pro hodnocení bezpečnosti HÚ (SÚRAO)

Aktivační produkty	Aktinidy					Štěpné produkty
Be-10	Th-229	Th-230	Th-232			Se-79
C-14	Pa-231					Sr-90
Cl-36	U-233	U-234	U-235	U-236	U-238	Zr-93
Ca-41	Np-237					Tc-99
Ni-59	Pu-238	Pu-239	Pu-240	Pu-242		Pd-107
Ni-63	Am-241	Am-242m	Am-243			Sn-126
Zr-93	Cm-244	Cm-245	Cm-246			I-129
Mo-93						Cs-135
Nb-94						Cs-137
Ag-108m						Sm-151
Ho-166m						

3 Uvažované transportní parametry

Výběr hodnot vybraných transportních parametrů vychází ze zprávy Havlová et al. (2015a), kde byly shrnuty obecné předpoklady pro hodnocení transportních parametrů jako vstupních dat pro hodnocení bezpečnosti.

Identifikace důležitých parametrů v této zprávě vycházela z následujícího zjednodušení popisu migrace radionuklidů z úložiště do biosféry. Je evidentní, že každý z níže uvedených parametrů je možno dále dělit na další a další parametry, které jsou potřebné pro jeho vyhodnocení.

Koncentraci radionuklidu j z úložné jednotky i , který migruje do biosféry, je možno vyjádřit následující rovnicí, kdy se prakticky uvažuje pouze 5 procesů:

- pokles aktivity radionuklidu za dobu transportu radionuklidů do biosféry v důsledku radioaktivní přeměny,
- srážení radionuklidů v důsledku překročení limitu rozpustnosti,
- retardace v geosféře,
- zředění a
- disperze radionuklidů v geosféře (Vokál et al., 2009).

$$C_{j\text{ibio}}(t) = C_{j\text{iggeo}}(t) \cdot e^{-\lambda \cdot T_i \cdot R_i} / G_i \quad (3.1)$$

kde $C_{j\text{ibio}}$ je koncentrace radionuklidu j v biosféře, $C_{j\text{iggeo}}$ je koncentrace radionuklidu j vstupujícího do geosféry, λ je přeměnová konstanta, T_i je doba migrace nesorbujících se radionuklidů do biosféry a R_i je retardační koeficient sorbujícího se radionuklidu v geosféře a G_i vyjadřuje faktor ředění a disperze radionuklidu v horninovém prostředí.

Doba migrace nesorbujících se radionuklidů do biosféry je složena z doby migrace radionuklidů v systému vzájemně propojených puklin a odpovídá době toku vody v puklinách. Propojenost puklin je jedním z důležitých faktorů ovlivňujících migraci radionuklidů v puklinovém prostředí. Celková doba toku radionuklidů (T_i) z jedné pukliny je složena z doby toku mnoha puklinami (T_k). Tato doba odpovídá poměru délky pukliny a rychlosti toku radionuklidů v puklině. V případě horniny obklopující ukládací soubory je proto možno zjednodušeně za jedny z nejdůležitějších parametrů považovat vzdálenost ukládacích souborů od hydraulicky aktivní zlomové či puklinové zóny a rychlost toku vody v puklině, jež odpovídá poměru Darcyho rychlosti a transportní porozity. Zředovací faktor geosféry G je pak zjednodušeně definován jako:

$$G = \frac{Q_{G/B}}{Q_{U/G}} \quad (3.2)$$

kde $Q_{G/B}$ je průtok podzemní vody na rozhraní geosféra-biosféra a $Q_{U/G}$ průtok podzemní vody na rozhraní úložný systém-geosféra.

Makrodisperze v puklinovém prostředí má stejný efekt jako ředění a není zvláště řešena zejména z důvodu, že je velmi obtížné určit disperzní koeficient v puklinovém prostředí. „Mikrodisperze“, reprezentovaná ředěním, je zahrnuta do retardačního koeficientu.

V případě sorbujících se radionuklidů je velmi významným parametrem retardační koeficient R_i , který závisí na velké řadě faktorů, jež budou dále podrobněji diskutovány v textu. Koncentrace radionuklidů v geosféře je dále ovlivněna maximální koncentrací radionuklidů v pórové vodě horniny.

Je však třeba si položit otázku, jak je možno zaručit, že hodnoty disperze a ředění zůstanou stejné po dobu tisíců let? Proto výběr vhodného úložného prostředí pro hlubinné úložiště není vhodné založit na příznivých počátečních hodnotách disperze a ředění. V bezpečnostních analýzách je však třeba s tímto faktorem vždy počítat a je nutné najít určitou konzervativní hodnotu, jež bude vyjadřovat možnou minimální hodnotu disperze a ředění v lokalitě.

Rozhodujícími parametry pro pokles koncentrace radionuklidu v horninovém prostředí směrem od HÚ RAO k biosféře jsou následující procesy:

- **rozpustnost radionuklidu** (ve zprávě Klajmon M. 2016)
- **difúze do horninové matrice**
- **sorpce na horninovou matici**

Pro popis těchto procesů musíme znát ještě další vedlejší parametry, charakterizující horninové prostředí, včetně podzemní vody, a to:

- porozitu horninové matrice ε ,
- hustotu horniny ρ ,
- vzdálenost, do níž je hornina v rovnováze s podzemní vodou v puklině δ ,
- rozevření (apertura) pukliny a ,
- složení podzemní vody,
- chemismus horniny.

V této zprávě se nezabýváme chemismem hornin, který bude výstupem další dílčích projektů tohoto projektu. Zbývající parametry jsou v této zprávě zhodnoceny a jsou navrženy hodnoty pro použití v hodnocení bezpečnosti.

4 Sorpce radionuklidů na granitické horniny

Jak je uvedeno v Aktualizaci referenčního projektu 2011, sorpce patří k jednomu z nejvýznamnějších procesů, které přispívají ke zpoždění radionuklidů vůči rychlosti hlavního toku.

Proces sorpce obvykle popisuje hodnota distribučního koeficientu (K_d). Jeho hodnoty ve zprávě Aktualizace referenčního projektu hlubinného úložiště (2011) byly převzaty převážně z prací finských a švédských, případně španělských (Vuorinen et al., 1998; Enresa, 1997; Lindgren a Lindström, 1999; Skagius et al., 1999; Byegard et al., 1998 a Smith et al., 1998). Ačkoli byl ve výběru dat preferován případ, kdy byl ve švédské bezpečnostní zprávě uvažován průnik ne-salinní vody (ledovcové), ve všech případech šlo o hodnoty pro horniny a roztoky, které nepocházely z Českého masivu.

V následujících částech zprávy se pokusíme tyto hodnoty zrevidovat a diskutovat, případně zasadit do kontextu vlastností hornin a složení podzemní vody v Českém masivu a přiblížit se zprávám Carbol a Engkvist (1997), Hakanen et al. (2012), které v přehledné podobě prezentují výběr sorpčních dat pro bezpečnostní rozborů ve Švédsku, respektive ve Finsku.

Předpokládáme, že data budou v průběhu dalšího průběhu projektu revidována na základě výsledků experimentálního programu s českými vzorky.

4.1 Aktivační produkty

4.1.1 Be

Hodnoty K_d pro Be jsou jen obtížně dostupné, a to zejména pro radioaktivní izotop. Ve zprávě Skagius et al. (1999) se předpokládá, že se Be chová jako Ra a z tohoto důvodu byla doporučena hodnota $0,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Tato hodnota byla uvedena v Aktualizaci referenčního projektu 2011.

V literatuře je možno nalézt publikace, věnující se sorpci Be na půdy, sedimenty či konstituenty hornin (You et al., 1989; Aldahan et al., 1999; Dibb and Rice, 1989; Hawley et al., 1986; ad.). Aldahan et al. (1999) porovnával sorpci neaktivního Be na biotit a albit jako jedny ze dvou významných konstituentů granitu. Hodnoty K_d se lišily o řád ($1,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ vers. $0,4 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ pro pH 6 a koncentraci $0,2 \text{ g/l}$ v NaOH). Tento systém přímo neodpovídá danému horninovému prostředí a složení podzemní vody, ukazuje však vzájemný vztah mezi jednotlivými složkami horniny. Pokud předpokládáme přítomnost dalších méně sorbujících minerálů v granitu, jako je např. křemen, pak je možno usuzovat, že zvolená hodnota $0,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ je vhodná pro použití pro bezpečnostní výpočty.

Doporučená hodnota: $0,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Skagius et al. (1999) na základě dat z Carbol a Engkvist (1997) pro Ra

4.1.2 C

^{14}C uvolněný z vyhořelého jaderného paliva se bude v prostředí podzemní vody ekvilibrovat především s anorganickým $\text{CO}_2\text{-HCO}_3\text{-CO}_3$.

Sorpčním mechanismem bude s největší pravděpodobností iontová výměna s karbonátovými minerály (kalcit, magnezit) v puklinových výplních. Ačkoli byly v některých případech experimentálně pozorovány hodnoty K_d až $0,08 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ jako konzervativní se však předpokládají hodnoty velmi nízké sorpce. To je ve shodě i s doporučeními Hakanena et al. (2012).

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu

Doporučená hodnota: $0,0005 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Lindgren a Lindström (1999) pro variantu Ceberg (málo salinní voda)

4.1.3 Cl

Chlor díky své aniontové formě v roztoku náleží ke konzervativním, tj. nesorbujícím se iontům (Carbol a Engkvist, 1997). Předpokládá se, že se nesorbuje.

Na druhou stranu výsledky ve zprávě Hakanena et al. (2012) říkají, že sorpce Cl v čerstvé a brakické vodě není 0 a doporučují použít hodnotu $1/3 K_d$ pro jod. Z konzervativních důvodů však doporučujeme použít hodnotu $0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

Doporučená hodnota: $0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: experimentální program, Carbol a Engkvist (1997)

4.1.4 Ni

Ni je ve vodném prostředí převážně dvojmocný a významně rozpustný ve vodě za $\text{pH} < 6,7$. Jako jeho analog je uvažován Co díky relativně malému rozdílu iontového poloměru a náboje. Sorpce je závislá především na hydrolýze Ni, a tedy i na pH (Carbol a Engkvist, 1997). Sorpčními mechanismy budou především kationtová výměna a povrchová komplexace (Hakanen et al., 2012).

Doporučované hodnoty se liší o řád, Carbol a Engkvist (1997) doporučují hodnotu K_d na základě starších měření (Ticknor et al., 1991) $0,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Lindgren a Lindström (1999) pro variantu Ceberg uvádí hodnotu $0,01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Hakanen et al. (2012) uvádějí hodnotu $0,15 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ pro málo salinní vody finské. Jako odpovídající hodnotu tedy doporučujeme hodnotu $0,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu

Doporučená hodnota: $0,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Hakanen et al. (2012) pro málo salinní vody

4.1.5 Zr

Zr se ve vodném roztoku vyskytuje převážně v oxidačním stavu +4. Chování přírodního Zr napovídá, že se prvek chová podobně jako Nb, U a Th (Choppin et al., 1995). Hydrolytická konstanta indikuje silnou hydrolyzu a formaci polymerních specií nad pH > 2 (Carbon a Engkvist, 1997). Kromě toho je nutno předpokládat i tvorbu koloidní částic. Rozpustnost Zr v podzemních vodách je obvykle nízká (Carbol a Engkvist, 1997; Hakanen et al., 2012)

Carbol a Engkvist doporučují realistickou hodnotu K_d $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ s nejistotou 0,5-3 $\text{m}^3 \text{ kg}^{-1}$, což představuje poněkud velmi široké rozpětí hodnot. V práci Hakanena et al. (2012) jsou doporučeny hodnoty 0,3-3 $\text{m}^3 \text{ kg}^{-1}$ pro různé horniny a málo salinní podzemní vodu. Z tohoto důvodu doporučujeme hodnotu $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu

Doporučená hodnota: $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Carbol a Engkvist (1997)

4.1.6 Mo

Molybden se v roztoku může vyskytovat v celé řadě oxidačních stupňů (+II až + VI). V okysličených vodách se bude vyskytovat v podobě MoO_2^- a HMoO_4^- , zatímco Mo(V), jako např. MoO^{2+} , MoO^{3+} a $\text{Mo}_2\text{O}_2^{4+}$, se budou s největší pravděpodobností vyskytovat v redukčních vodách (Brookins, 1988). Za silně redukčních podmínek se dá předpokládat ještě další redukce na méně rozpustné formy (MoO_2 a MoS_2). V půdách (a tedy i v horninách) se může silně sorbovat na Fe/Al hydroxidy a také na organickou hmotu. Tato vazba je silná především v acidické oblasti (pH < 5-6; Gustafsson a Tiberg, 2012). Vzhledem k aniontové formě lze předpokládat, že sorpce Mo bude obdobná jako sorpce jiných aniontových forem stopových prvků, jako je As, Se, P (Hakanen et al., 2012).

Hodnoty doporučené ve finské zprávě Hakanena et al. (2012) doporučují hodnoty pro různé typy horniny od $1,7 \cdot 10^{-4}$ - $1,6 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. V Aktualizaci referenčního projektu 2011 byla použita hodnota $5,0 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ ze starší finské zprávy Smith et al. (2008). Vzhledem k tomu, že tato hodnota jednoznačně zapadá do výše zmíněného intervalu, doporučujeme tuto hodnotu ponechat.

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu

Doporučená hodnota: $0,0005 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Smith et al. (2008)

4.1.7 Nb

Niob se bude ve vodném roztoku vyskytovat v oxidačním stavu +V. Předpokládá se, že rozpustné formy budou převážně aniontových hydroxokomplexů (Baes a Mesmer, 1986).

Carbol a Engkvist (1997) doporučují vzhledem k značným nejistotám, spojeným s nedostatkem experimentálních dat, hodnotu $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$, tedy stejnou jako pro ^{93}Zr . Kromě toho Hakanen et al. (2012) uvádějí experimentální program, prováděný na horninách z Oikiluoto, kde byly naměřeny hodnoty K_d mezi $0,32\text{-}1,9 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. I z tohoto důvodu doporučujeme zvýšit hodnotu K_d z původně doporučené hodnoty $0,5 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ (Lindgren a Lindström, 1999) pro málo salinní vody (lokality Ceberg) na $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ tak, jak je tomu u Zr.

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu

Doporučená hodnota: $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Carbol a Engkvist (1997)

4.1.8 Ag

Hakanen et al. (2012) udává, že nejvýznamnějšími formami Ag ve vodném roztoku budou stříbrný kationt Ag^+ a komplex s chlorem. Lze předpokládat, že jedinou sorbující se formou je Ag^+ kationt vlivem předpokládané kationtové výměny.

Carbol a Engkvist (1997) doporučují vzhledem k značným nejistotám, spojeným s nedostatkem experimentálních dat, hodnotu stejnou jako u Cs, tj. v případě citované zprávy $0,5 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ pro nenasalinní vodu. Hakanen udává, že v literatuře nejsou žádná relevantní data pro sorpci Ag na horniny, pouze pro bentonit a půdu. Hodnoty K_d jsou pak vypočteny na základě dat pro sorpci Ag na biotit. Rozpětí doporučených hodnot K_d pro horniny z Oikiluoto je pak v rozpětí $6 \cdot 10^{-6}\text{-}1,4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Tyto hodnoty jsou o několik řádů nižší než doporučená hodnota Carbola a Engkvista (1997) či hodnota použitá v Aktualizaci referenčního projektu (2011) $0,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ (Lindgren a Lindström, 1999). Vzhledem k rozsahu hodnot doporučujeme tuto hodnotu ponechat, pokud tomu nebude jinak.

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu.

Doporučená hodnota: $0,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Carbol a Engkvist (1997)

4.1.9 Ho

V roztocích se vyskytuje pouze v mocenství Ho(III). Lanthanidy obecně silně hydrolyzují za $\text{pH} > 6$. Silná hydrolyza vede k tomu, že v oblasti $\text{pH} 8\text{-}9$ jsou plně hydrolyzovány a vykazují silnou sorpci. Nárůst pH , např. vlivem přítomnosti cementu, může vést ke snížení mobility lanthanidů obecně (Carbol a Engkvist, 1997).

Ze skupiny lanthanidů jsou obvykle sledovány Eu a Pm, které vykazují poměrně silnou sorpci, ačkoli o něco nižší než aktinidy (Carbol a Engkvist, 1997). Tito autoři také prezentují řadu výsledků sorpčních studií pro Eu, Ce, Nd, Tm a Yb.

Žádná ze zpráv, ani jiná literatura, neudává přímo hodnoty pro sorpci holmia na horniny, kromě doporučených dat z Lindgren a Lindström (1999). Avšak ačkoli Lindgren a Lindström (1999) udává jako zdroj Carbola a Engkvista (1997), tento element se v této zprávě nevyskytuje. Skagius et al. (1999) doporučuje $2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ pro nesalinní vodu. Vzhledem k nejjasnostem v původu hodnoty doporučujeme konzervativně použít původní $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu.

Doporučená hodnota: $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Lindgren a Lindström (1999)

4.2 Štěpné produkty

4.2.1 Se

Selen se v přírodě může vyskytovat v několika oxidačních stavech (-II, 0, IV, VI). Oxidační stav selenu je v redukčním a silně redukčním prostředí Se(-II) a Se(0) (Séby, 2001). Selenidový anion Se^{2-} je svými vlastnostmi velmi podobný sulfidům S^{2-} , a se stejnými kationty jako sulfidy tvoří nerozpustné minerály. Za oxidačních podmínek dochází k rychlé oxidaci selenidu na seleničitan. V aerobních podmínkách je selen přítomen ve formě seleničitanu $\text{Se}^{\text{IV}}\text{O}_3^{2-}$ a selenanu $\text{Se}^{\text{VI}}\text{O}_4^{2-}$. Selenan je charakteristický svou nízkou adsorpční kapacitou, díky které je řazen mezi nesorbující se mobilní specie. V prostředí středních redoxních potenciálů se selen vyskytuje v oxidačním stavu Se(+IV), přičemž jeho mobilita je dána charakterem pevné fáze a sorpčním/desorpčními procesy, probíhajícími na jejím povrchu.

Carbol a Engkvist (1997) uvádí, že pro vybrané materiály sorpce selenu klesá v pořadí hematit > goethit > biotit > montmorillonit > granit. Jak je vidět, nejvyšší sorpce selenu je udávána pro sloučeniny železa (tzv. Fe-minerály), z čehož je patrné, že záchyt selenu přímo souvisí s přítomností železa v sorbentu. Intenzita sorpce selenu na granitoidní horniny je významně závislá na mineralogickém složení horninového materiálu, které zahrnuje minerály tvořící samotnou horninovou matici (křemen, živce, slídy).

Pro Aktualizaci referenčního projektu 2011 byla doporučena hodnota $0,00005 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$, doporučená v práci Lindgren a Lindström (1999). Rozsáhlá práce K. Videnské (Videnská, 2015; Videnská et al., 2013; Štamberg et al., 2014 a Videnská et al., 2014) sledovaly i sorpci Se(IV) a Se(VI) na mletý granitový materiál z Českého masivu (Melechov). Studium ukázalo, že Se(IV) se sorbuje na granitický materiál, zatímco Se(VI) nikoli. Ve zprávě Havlové et al. (2015a) byla provedena analýza výsledků sorpčních experimentů a byly doporučeny hodnoty K_d . Tyto K_d doporučujeme použít pro bezpečnostní výpočty, protože pocházejí z experimentálního ověření chování Se v podmínkách hornin Českého masivu.

Doporučená hodnota: Se(IV) $0,03 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Se(VI) $0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

 SÚRAO	Odhad hodnot transportních charakteristik krystalinických hornin Českého masivu	Evidenční označení:
		TZ 102/2017

Zdroj: Havlová et al. (2015a)

4.2.2 Sr

Sr se v roztocích vyskytuje jako kation Sr^{2+} , s karbonáty a hydroxidy vytváří komplexy. Svými chemickými vlastnostmi se Sr^{2+} podobá Ca^{2+} a obvykle se považuje za analog Ra.

V případě sorpce stroncia na granit je sorpce stroncia ovlivněna pH, iniciální koncentrací stroncia v roztoku, iontovou silou kapalné fáze a přítomností konkurenčních iontů v roztoku (Bascetin et al., 2006; Andersson et al., 1983). Mechanismem sorpce stroncia je neselektivní iontová výměna, přičemž byla pozorována rovněž souvislost mezi K_d a CEC materiálu a vyměnitelným Ca^{2+} v pevné fázi (Andersson a Allard, 1983)

Při sorpci stroncia např. na montmorillonit nebo granit byly pozorovány nižší hodnoty K_d při rostoucí iniciální koncentraci stroncia v roztoku (Bascetin et al., 2006). Kūtahyali et al. (2012) uvádí, že maximální sorpce stroncia na granit byla pozorována při pH 7-9 a koncentraci stroncia 10 ppm. Jung et al. (2001) sledovali sorpci stroncia na granit v závislosti na pH, koncentraci stroncia v roztoku a přítomnosti konkurenčních iontů. Výsledky ukázaly, že vliv pH na sorpci je patrný při vyšších koncentracích stroncia v roztoku. Iniciální koncentrace stroncia v roztoku rovněž ovlivnila výsledné hodnoty K_d . Záchyt stroncia byl ovlivněn rovněž přítomností konkurenčních iontů Mg^{2+} a Ca^{2+} , naopak přítomnost Na^+ nemá na sorpci stroncia významný vliv. Rostoucí koncentrace konkurenčních iontů měla za následek pokles K_d .

Pro Aktualizaci referenčního projektu 2011 byla doporučena hodnota $0,0001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$, doporučená v práci Lindgren a Lindström (1999). Sorpci Sr na granitické horniny Českého masivu byla věnována řada prací (Palágyiho et al., 2009; 2010; 2013; práce P. Franty v souhrnné zprávě Červinka et al. (2012) a K. Videnské v Havlová et al., 2013a).

V práci Havlové et al. (2015a) byly tyto práce shrnuty a vyhodnoceny pro:

- neporušený granit,
- jiný typ horniny než granit (diorit, gabro),
- dynamické podmínky,
- granit s puklinovou výplní.

Pro sorpci na neporušený granit byla doporučena hodnota $0,08 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ jako střední hodnota souboru dat.

Doporučená hodnota: $0,08 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Havlová et al. (2015a)

4.2.3 Tc

Technecium patří do 7. skupiny periodické tabulky prvků mezi přechodné prvky. Chemickými vlastnostmi se podobá rheniu. Ve sloučeninách se vyskytuje v oxidačním stavu od -I do +VII, přičemž nejstabilnější forma je TcO_4^- ; v nižších mocenstvích má technecium tendenci ke tvorbě komplexních sloučenin, např. s ligandy obsahujícími donorové atomy dusíku a síry.

Technecium patří mezi redox senzitivní prvky, jeho speciace závisí na redoxním potenciálu prostředí. Za oxidačních podmínek se technecium vyskytuje v oxidačním stavu Tc(VII) ve formě aniontu TcO_4^- . V redukčních podmínkách je dominantním oxidačním stavem Tc(IV), přičemž konkrétní specie je dána pH prostředí. Při pH 3-9 je technecium přítomno ve formě $\text{TcO}(\text{OH})_2(\text{aq})$ nebo ve formě nerozpustného $\text{TcO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}(\text{s})$ (Vinšová et al., 2006).

Za aerobních podmínek se technecium v přírodních systémech vyskytuje v oxidačním stavu +VII ve formě aniontu TcO_4^- . Ten je charakteristický svou vysokou rozpustností a pohyblivostí a nízkým záchytem v geologických systémech. Možnost imobilizace Tc a zabránění jeho dalšímu pohybu je redukce na nižší oxidační stavy. Přítomnost Fe^{II} v systému vede k redukci technecia Tc^{VII} na Tc^{IV} , které představuje stabilní, nerozpustnou specii $\text{Tc}(\text{IV})\text{O}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ za redukčních nebo anoxických podmínek (Zachara et al., 2007).

Redukce TcO_4^- na Tc(IV) probíhá za nízkých redoxních potenciálů, v aerobním prostředí je sorpce TcO_4^- nepatrná (Carbol a Engkvist, 1997). Doporučená hodnota K_d je v tomto případě $0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Andersson a Allard (1983) zdůrazňují vliv redoxních podmínek na sorpci technecia na horninový materiál, za anaerobních podmínek uvádí 10-100× vyšší hodnoty K_d . Hakanen et al. (2012) uvádí, že nejsou dostupná data pro sorpci Tc za anoxických podmínek a uvádí doporučené hodnoty K_d pro horniny z oblasti Oikiluoto v rozmezí $0,3-3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

V práci Havlové et al., (2015a) byly vyhodnoceny experimentální výsledky sorpce Tc na granit Českého masivu, kdy střední hodnota dosahovala $0,0035 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ (pro oxidační prostředí). Vzhledem k původně navržené hodnotě ($0,3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ z práce Lindgren a Lindström, 1999) bychom tedy doporučili konzervativnější hodnotu, která je podpořena experimentálními daty.

Doporučená hodnota: $0,0035 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Havlová et al. (2015a)

4.2.4 Pd

O Pd lze předpokládat, že se bude chovat podobně jako Ni a Co. Hakanen et al. (2012) předpokládá, že za redukčních podmínek bude docházet k redukci Pd(II) na Pd(0) s extrémně nízkou rozpustností ve vodě.

Carbol a Engkvist (1997) nenašli v literatuře žádná relevantní data a doporučují hodnoty K_d $0,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ na základě analogií s výše zmíněnými kovy. Hakanen et al. (2012) sice odkazují k datům JAEA, ale následně říkají, že rovněž nenašli relevantní data, a doporučují stejné hodnoty K_d jako pro Ni(II). Pokud toto vezmeme do úvahy, pak doporučujeme stejnou hodnotu K_d jako pro výše uvedený Ni (Hakanen et al., 2012; málo salinní vody).

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu

Doporučená hodnota: $0,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Hakanen et al. (2012) pro málo salinní vody

4.2.5 Sn

Cín je redox senzitivní prvek, vyskytující se v oxidačních stavech II, IV. Rozpustnost cínu je převážně dána rozpustností amorfního SnO_2 . V silně redukčním prostředí se může rozpustnost cínu zvýšit v důsledku redukce Sn(IV) na Sn(II) .

V granitickém prostředí je pro chování cínu rozhodující přítomnost organického uhlíku a množství chloridů v podzemních vodách. S rostoucí koncentrací rozpuštěného uhlíku klesá sorpční schopnost cínu. V přítomnosti velkého množství chloridů může dojít ke změně speciace cínu. Takto vznikají aniontové specie cínu SnCl_3^- a SnCl_5^- , které výrazně mění jeho sorpční chování (Carbol a Engkvist, 1997). Chování cínu v granitickém prostředí studovali Ticknor a spol., autoři zjistili, že záchyt Sn na granit se vzrůstajícím pH klesá (Ticknor, 1996).

Hakanen et al. (2012) odkazuje na experimentální práce s horninami z lokality Oikiluoto (^{113}Sn) a na jejich základě doporučuje hodnoty K_d v rozmezí $0,3\text{--}16 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ pro nenaslenné vody. Carbol and Engkvist (1997) doporučují hodnotu $0,001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ na základě práce Albinssona (1991), ale jen na základě nedostatku recentních dat. V Aktualizaci referenčního projektu 2011 byla doporučena hodnota K_d $0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ na základě souboru dat z práce Lindgren a Lindström (1999). Vzhledem k prezentovanému rozpětí dat doporučujeme použít hodnotu $5 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ (Carbol a Engkvist, 1997), a to zejména ve vztahu k dalším IV+ prvkům Th a Pu, kde se předpokládá nárůst sorpce v řadě $\text{Th} < \text{Pu} < \text{Sn}$ (Hakanen et al., 2012).

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu

Doporučená hodnota: $5 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Carbol a Engkvist (1997)

4.2.6 I

Jód patří mezi redox senzitivní prvky. V prostředí podzemních vod se vyskytuje převážně jako I⁻. Je velmi rozpustný, protože kovy, se kterými tvoří špatně rozpustné iodidy (např. Pb nebo Ag) se v tomto prostředí vyskytují pouze ve stopových koncentracích. V povrchových vodách by část I mohla být přítomna v podobě IO_3^- .

Vzhledem k aniontové formě I lze předpokládat velmi malou sorpci. Hakanen et al. (2012) prezentuje několik prací, které se věnovaly sorpci jódu na horniny, avšak většinou v salinní vodě. Hodnoty definované pak jako doporučené hodnoty K_d v různých typech vod jsou velmi nízké, je však pozorovatelná jednoznačná závislost klesající sorpce s rostoucí salinitou roztoku. Doporučené hodnoty K_d pro nenaslenné vody jsou v řádu $10^{-6} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Carbol a Engkvist (1997) doporučují $0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

V práci Havlové et al. (2015) byl vyhodnocen soubor sorpčních experimentů s I pro české granitické horniny. Soubor nebyl dostatečně homogenní, a proto byl doporučen interval K_d $0\text{--}10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Vzhledem ke konzervativnosti přístupu doporučujeme hodnotu $0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

V současné době existuje pouze omezené experimentální ověření pro podmínky a vzorky z Českého masivu

Doporučená hodnota: $0 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Lindgren a Lindström (1999)

 SÚRAO	Odhad hodnot transportních charakteristik krystalinických hornin Českého masivu	Evidenční označení:
		TZ 102/2017

4.2.7 Cs

Cesium patří mezi alkalické kovy. V životním prostředí se vyskytuje ve formě kationtu Cs^+ , netvoří komplexy a jeho chování není ovlivněno změnami pH a redoxními vlastnostmi prostředí.

V životním prostředí je kation Cs^+ charakteristický svou sorpcí na jílové materiály. Cs^+ je zachyceno v mezivrstvi těchto materiálů mechanismem kationové výměny, čímž dochází k efektivnímu odstraňování cesia pocházejícího ze spadu z vodních zdrojů. Záchyt může být ovšem ovlivněn pH, koncentrací cesia, složením vodné fáze nebo kationtově výměnnou kapacitou materiálu, kdy vyšších hodnot K_d je dosaženo u materiálů s CEC. Sorpce cesia naopak není ovlivněna redoxními podmínkami (Cornell, 1993; Andersson a Allard, 1983).

Ve stopovém množství ($< 10^{-8}$ mol/l) je hodnota K_d na koncentraci cesia nezávislá. Sorpci cesia ovlivňuje rovněž přítomnost přírodního cesia v pevné fázi, jeho obsah má za následek nižší hodnoty K_d a dojem lineární sorpce. Sorpční data by proto měla být korigována vzhledem k obsahu přírodního cesia v sorbentu.

Dalším faktorem, ovlivňujícím sorpci cesia, je přítomnost konkurenčních iontů v kapalně fázi (Missana et al., 2014). Z tohoto hlediska jsou nejvýznamnější kationty Na^+ , K^+ , Ca^{2+} a Mg^{2+} . (Cornell, 1993).

Hodnoty K_d pro cesium se od sebe vzájemně liší i o několik řádů, nejvyšší hodnoty K_d jsou uváděny pro slídu, illit nebo montmorillonit. Výsledná hodnota K_d je potom dána složením a procentuálním zastoupením jednotlivých minerálů ve směsi (Cornell 1993). V úvahu je ovšem nutné brát také možné vzájemné interakce mezi jednotlivými minerály ve směsi a rovněž jejich interakce s kapalnou fází.

Andersson a Allard (1983) uvádí hodnoty K_d pro granit v rozsahu $0,0035-0,380 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Carbol a Engkvist (1997) uvádí K_d v rozsahu $0,050-0,5 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ v závislosti na iontové síle kapalně fáze, Hakanen et al (2012) $0,05-1,3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ pro nenasalinné vody, přičemž je patrný pokles sorpce s rostoucí salinitou roztoku.

V Aktualizaci referenčního projektu byla navržena hodnota $0,01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$, založená na práci Lindgren a Lindström (1999). V práci Havlové et al. (2015a) byl vyhodnocen soubor hodnot sorpčních experimentů s českými granity. Střední hodnota K_d pro tento soubor dat byla $0,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Vzhledem k předběžným výsledkům sorpčních experimentů navrhuje tuto hodnotu zachovat.

Doporučená hodnota: $0,1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Havlová et al. (2015a)

4.2.8 Sm

Samarium náleží do skupiny lanthanoidů, stejně tak jako Ho či Eu. Vzhledem k tomu, že existuje jen omezené množství informací o sorpci těchto prvků a práce typu Carbol a Engkvist (1997) či Hakanen et al. (2012) se odvolávají na obdobné analogie, doporučujeme použít obdobnou hodnotu jako pro Ho.

 SÚRAO	Odhad hodnot transportních charakteristik krystalinických hornin Českého masivu	Evidenční označení:
		TZ 102/2017

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu

Doporučená hodnota: $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Carbol a Engkvist (1997)

4.3 Aktinidy

Studium sorpce aktinidů je komplikované z celé řady důvodů. Jednak jsou citlivé ke tvorbě pravých koloidů. Za druhé mají obvykle nízký limit rozpustnosti, většinou nižší než 10^{-10} mol/l pro čtyřvalentní aktinidy. Za třetí, část z nich má komplikovanou chemii, při které může koexistovat několik oxidačních stavů, jako např. u U, Pu či Np.

4.3.1 Th

Thorium se v podzemních vodách vyskytuje především ve formě (+IV) mocného kationtu, který snadno podléhá hydrolyze, přičemž lze očekávat především specii $\text{Th}(\text{OH})_4(\text{aq})$ (Carbol and Engkvist, 1997). Za vyšších pH je jedinou přítomnou specií (Hakanen et al., 2012). Příspěvek karbonátových komplexů by bylo možno očekávat ve vodách s vyšším obsahem CO_2 .

Hakanen et al. (2012) doporučuje hodnoty v souladu ve vztahu k dalším (+IV) valentním prvkům Sn a Pu, kde se předpokládá nárůst sorpce v řadě $\text{Th} < \text{Pu} < \text{Sn}$ (Hakanen et al., 2012), tj. přibližně o polovinu menší než pro Sn. Hodnoty prezentované v této zprávě se pohybují od $0,3\text{-}8 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Na druhé straně Carbol a Engkvist (1997) doporučují hodnotu $5 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$, což by předpokládalo, že K_d pro Sn bude cca $10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

Vzhledem k prezentovanému rozpětí dat doporučujeme použít hodnotu $3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu

Doporučená hodnota: $3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Skagius et al. (1999)

4.3.2 Pa

O komplexaci Pa není v literatuře příliš mnoho informací. Pa se ve sloučeninách vyskytuje v oxidačních stavech +III až +V, přičemž se dá přepokládat, že Pa(V) je nejpravděpodobnější formou v podzemní vodě a dominuje svou hydrolyzou specií prvku za daných podmínek. Baes a Mesmer (1986) předpokládají, že se v rozmezí pH 6-10 vyskytuje ve formě $\text{PaO}_2(\text{OH})$. Duro et al. (2006) udává, že v redukčních podmínkách bude za pH 6-10 dominovat specie $\text{PaO}(\text{OH})^+(\text{PaO}_2)^+$. Fourest et al. (2004) ve své práci dochází k závěru, že v zásaditých aerobních podmínkách se vytváří aniontový hydroxokomplex Pa(V), pravděpodobně $\text{PaO}_2(\text{OH})^{2-}$. Rozpustnost narůstá s rostoucím pH.

Kulmala et al. (1996) sledoval sorpci Pa na horniny z oblasti Oikiluoto, avšak s využitím salinní podzemní vody. Z výsledků je patrné, že sorpce klesá se salinitou roztoku a hodnoty K_d pro nenaslennou podzemní vodu se pohybují až kolem $10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ v porovnání se salinním roztokem. Hakanen na základě těchto výsledků doporučuje jako nejlepší odhad pro nenaslennou vodu horniny v rozmezí $0,4\text{--}2 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Carbol and Engkvist (1997) doporučují hodnotu $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. V Aktualizaci referenčního projektu 2011 byla doporučena na základě práce Lindgren a Lindström (1999) hodnota $0,5 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

Vzhledem k rozsahu intervalu doporučujeme použít hodnotu $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu

Doporučená hodnota: $1 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Carbol and Engkvist (1999)

4.3.3 U

Speciace U je dlouhodobě studována pro nejrůznější prostředí podzemních vod. Známé jsou především základní práce Langmuira (1978), Brookinse (1988) či Higgsa (1988). Z českého prostředí je to především práce Pačese (1969), pojednávající o oxidačně redukční zonálnosti uranových specií na ložisku Jáchymov.

U(VI) je dominantní za slabě redukčních či oxidačních podmínek. V prostředí, přístupném vzdušnému CO_2 jsou dominantními speciemi $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$ a $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$ (Langmuir 1978). U(IV) dominuje ve silně redukčním prostředí, přičemž dominantní specií je $\text{U}(\text{OH})_4$. Ačkoli se dá předpokládat, že v oblasti blízkého pole a velké části vzdáleného pole interakcí se U bude vyskytovat ve formě U(IV), nelze vyloučit ani přítomnost vod se zvýšeným obsahem O_2 a CO_2 a tedy i formami U(VI).

Sorpčním mechanismem uranylového iontu za oxidačních podmínek a nízkých hodnot pH je kationtová výměna (Ticknor, 1996). Ve vodách chudých na CO_2 při sorpci na alumosilikátové minerály za $\text{pH} > 4$ dominují kopplexy $\text{UO}_2(\text{OH})^+$ a $\text{UO}_2(\text{OH})_2$ (Hakanen et al., 2012). V roztocích obsahujících CO_2 za vyšších hodnot pH sorpce klesá neboť U(VI) karbonátové komplexy se nesorbují.

Za redukčních podmínek a nízké koncentrace CO_2 je hlavní specií U v roztoku $\text{U}(\text{OH})_4$. Obě práce Carbol a Engkvist (1997) a Hakanen et al. (2012) se shodují, že v literatuře prakticky neexistují data pro sorpci U(IV) na granit. Sorpce U za anoxických podmínek byla sledována pro horniny z lokality Oikiluoto, podíl U(IV) však byl jen 34 % (Hakanen et al., 2012).

Pro hodnocení bezpečnosti navrhuje Carbol and Engkvist vzhledem k pravděpodobné speciaci hodnotu $0,01 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. To je konzervativní řešení, protože mimo uvažování podobnosti U(IV) thoriumu uvažuje i nižší sorpci záporně nabitých komplexů U(VI). Hakanen v souboru dat Hakanen et al. (2012) navrhuje hodnoty nižší v rozmezí $0,00005\text{--}0,0084 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

Vzhledem k probíhajícímu experimentálnímu programu, kdy se hodnoty K_d pohybují v řádu $10^{-4} - 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ navrhuje konzervativní hodnotu $0,001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$.

Doporučená hodnota: $0,001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

 SÚRAO	Odhad hodnot transportních charakteristik krystalinických hornin Českého masivu	Evidenční označení:
		TZ 102/2017

Zdroj: Carbol and Engkvist (1999)

4.3.4 Pu

Chemie Pu je velmi komplikovaná. V přírodních vodách se může vyskytovat v oxidačních stavech Pu(III), Pu(IV), Pu(V) a Pu(VI) s velmi nízkými limity rozpustnosti kolem 10^{-10} mol/l. Za redukčních podmínek budou hlavními speciemi PuCO_3^+ , Pu^{3+} , a $\text{Pu}(\text{OH}^{2+})$. Za oxidačních podmínek se předpokládají především rozpustné specie $\text{Pu}(\text{OH})_4(\text{aq})$ (Carbol a Engkvist, 1997).

Hakanen et al. (2012) doporučuje hodnoty separátní hodnoty K_d pro Pu(III) a Pu(IV). Carbol a Engkvist (1997) doporučuje volbu konzervativních hodnot v dolním intervalu dostupných výsledků ($0,1-10 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$) a doporučuje hodnotu $3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ jako pro všechny ostatní čtyřvalentní aktinidy.

V současné době neexistují experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu

Doporučená hodnota: $3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Carbol a Engkvist (1997)

4.3.5 Np

Neptunium může existovat v několika oxidačních stavech od III do VII. V přírodních vodách jsou obvyklé oxidační stavy III, IV a V. Chování Np(IV) je podobné chování Th(IV), včetně tvorby neutrálního $\text{Np}(\text{OH})_4(\text{aq})$, dominujícímu speciaci Np ve vodách s malým obsahem CO_2 a redukčním prostředím. Np(V) existuje primárně jako $\text{NpO}_2(\text{OH})(\text{aq})$ nebo $\text{NpO}_2(\text{CO}_3)^-$ v oxidačním prostředí (Albinsson, 1991). Rozdíl v sorpci mezi oxidovanou a redukovanou formou může být klíčovým pro hodnocení bezpečnosti. Zatímco Np(V) v aerobních experimentech se sorbovalo pouze mírně ($K_d = 0,001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$; Ticknor, 1996), lze předpokládat, že sorpce Np(IV) bude silnější.

Toto číslo je i v souladu s experimenty Buňatové et al. (1995), kdy studovala sorpci Np na mletý granit z lokality Melechov. Střední hodnota K_d z tohoto omezeného souboru dat dosáhla $0,001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$. Vyšších hodnot nedosáhl ani experiment s materiálem puklinové výplně.

V současné době neexistují nové experimentálně ověřené hodnoty pro podmínky a vzorky z Českého masivu.

Z tohoto důvodu na základě doporučení Carbola a Engkvista (1997) doporučujeme hodnotu $3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ pro Np(IV) a $0,001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ pro Np(V).

Doporučená hodnota: Np(IV) $3 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$; Np(V) $0,001 \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

Zdroj: Carbol a Engkvist (1997)

4.3.6 Am

Chemie curia a americia je podobná. V uvažovaných podmínkách budou oba prvky v oxidačním stavu III. Vzhledem k chemické podobnosti jsou pro Am často používány i hodnoty pro lanthanidy (III) - často pro Eu(III) (Hakanen et al., 2012). Ačkoli podléhá silné hydrolýze, je možná i přítomnost karbonátových nebo smíšených hydroxokarbonátových komplexů. Kromě toho mohou mít vliv i silikátové komplexy a náchylnost k tvorbě koloidů. Vzhledem k nízké rozpustnosti je nutno při sorpčních experimentech klást velký důraz na nepřekročení limitní koncentrace.

Míra sorpce je obdobná jako pro ostatní čtyřvalentní radionuklidy s K_d v rozmezí 1-10 m³ kg⁻¹ (Carbol a Engkvist, 1997). Autoři doporučují hodnotu 3 m³ kg⁻¹. Hakanen et al. (2012) na základě modelování doporučuje set K_d pro horniny z lokality Oikiluoto v rozmezí 0,09-3 m³ kg⁻¹ pro nenasycené vody.

Ve starších pracích Palagyiho byla sledována sorpce Eu na mleté granitické horniny z Příbrami. Střední hodnota K_d ze setu experimentů, prováděných v aerobním prostředí, dosáhla hodnoty 0,19 m³ kg⁻¹. Nicméně už při vyhodnocení těchto výsledků se ve zprávě Havlové et al. (2015a) objevila otázka možné hydrolýzy a vyloučení tohoto radionuklidu z roztoku.

Na základě této argumentace tedy doporučujeme hodnotu z Carbol a Engkvist (1997) 3 m³ kg⁻¹ i pro horniny z Českého masivu.

Doporučená hodnota: 3 m³ kg⁻¹

Zdroj: Carbol a Engkvist (1997)

4.3.7 Cm

Chemie curia a americia jsou podobné. V uvažovaných podmínkách budou oba prvky v oxidačním stavu III. Pro curium se obvykle používají hodnoty sorpčních koeficientů pro Am(III).

I z tohoto důvodu doporučujeme hodnotu 3 m³ kg⁻¹ i pro horniny z Českého masivu.

Doporučená hodnota: 3 m³ kg⁻¹

Zdroj: Carbol a Engkvist (1997)

4.4 Shrnutí

Data sorpčních koeficientů K_d pro relevantní radionuklidy jsou shrnuta v následující tabulce.

Tab. 2 Doporučené hodnoty sorpčních koeficientů K_d pro relevantní radionuklidy dle expertního výběru, popsaného v 4.

Radionuklid	K_d ($m^3 kg^{-1}$)
Be	0,1
C	0,0005
Cl	0
Ni	0,1
Zr	1
Mo	0,0005
Nb	1
Ag	0,1
Ho	1
Se	0,03 Se(IV) 0 Se(VI)
Sr	0,08
Tc	0,0035
Pd	0,1
Sn	5
I	0
Cs	0,1
Sm	1
Th	3
Pa	1
U	0,0001
Np	3 Np(IV) 0,001 Np(V)
Pu	3
Am	3
Cm	3

5 Difúze radionuklidů v horninovém prostředí granitů

Míra difúze radionuklidů v horninovém prostředí je vyjadřována pomocí efektivního difúzního koeficientu D_e ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$). Hodnoty difúzních koeficientů D_e pro hodnocení bezpečnosti byly uvedeny ve zprávě Aktualizace referenčního projektu hlubinného úložiště (2011), kde byly převzaty ze zprávy Lindgren a Lindström (1999), kam byly přežaty ze zprávy Ohlson a Neretnieks (1997). Všechny hodnoty odpovídají realistickému odhadu, kromě Ag, kde je použit pesimistický odhad ze zprávy Lindgren a Lindström (1999). Hodnoty pro Be pocházejí ze zprávy Skagius et al. (1999). Hodnoty byly dle možností přebírány pro nesalinní vody.

Pro horniny potenciálních lokalit existuje pouze velmi omezený soubor experimentálních dat pro studium difúze. Jde o experimenty s ^3H , ^{36}Cl a ^{125}I (viz elektronická Příloha 1; experimentální program běží). Z tohoto důvodu je nutno zbývající data pro difúzi převzít ze zahraniční literatury s přihlédnutím ke specifickým hornin Českého masivu.

Zpráva Ohlsson a Neretnieks (1997) odvozuje hodnoty difúzních koeficientů od efektivního difúzního koeficientu HTO a difúzních koeficientů jednotlivých radionuklidů ve volné vodě D_w ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$) pro průměrnou hodnotu. Předpokládá se, že $D_e(\text{HTO})$ je $1.10^{-13} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ pro F_T kolem $4-5 \cdot 10^{-5}$ a odvozuje D_e z poměru $D_w(\text{radionuklid})/D_w(\text{HTO})$. Kromě toho v závislosti na charakteru daného radionuklidu a předpokládaného procesu, který může ovlivňovat jeho migraci (aniontová exkluze, povrchová difúze), přiřazuje některým radionuklidům faktor f , který simuluje vliv tohoto procesu, a to $f = 0,1$ pro aniontovou exkluzi pro C, Cl a I a $f = 10$ pro Cs a Sr pro povrchovou difúzi a jejich možnou akceleraci. Pro některé radionuklidy, a to zejména ze skupiny aktinidů, však používá hodnoty $D_w = 1.10^{-9} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ bez zřejmého použití reálných hodnot (pravděpodobně nebyly dostupné).

Pokud uvážíme odlišné vlastnosti hornin Českého masivu, pak je možno daný postup použít pro odvození hodnot D_e i pro podmínky lokální. Pokud zvolíme hodnotu D_e , odvozenou jako medián dostupného souboru dat pro horniny z potenciálních lokalit - $3,1.10^{-13} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ pro průměrnou hodnotu porozity 0,4 % a hodnotou F_T $3,5.10^{-4}$ (Havlová et al., 2015; experimentální program; elektronická Příloha č. 1), pak je možno jednoduchým přepočtem obdržet soubor dat, uvedený v Tab. 3. Výpočet je uveden v elektronické příloze č. 2. Hodnoty Be jsou ponechány v původních hodnotách. Tyto hodnoty budou revidovány s přihlédnutím k probíhajícímu experimentálnímu programu.

Tyto hodnoty jsou hodnotami **REALISTICKÝMI**. Pro hodnocení bezpečnosti je možno použít samozřejmě konzervativní přístup a použít hodnoty konzervativní, získané postupem, jaký je navržen v práci Lindgren a Lindström (1999), kdy jsou hodnoty realistické poníženy o 1 řád. Totéž bylo provedeno i v Tab. 3.

Tyto hodnoty jsou pouze prvním přiblížením k získání hodnot pro bezpečnostní výpočty. Vzhledem k nejistotám v hodnotách některých D_w a probíhajícímu experimentálnímu programu budou navržené hodnoty revidovány a případně upraveny.

Tab. 3 Navržený soubor realistických a konzervativních efektivních difúzních koeficientů D_e ($m^2 s^{-1}$). Jejich hodnota byla vypočtena na základě postupu, uvedeného ve Skagius a Neretnieks (1997), a předpokládané hodnotě $D_e(HTO)$ $3,1 \cdot 10^{-13} m^2 s^{-1}$ pro průměrnou hodnotu porozity hornin ČM 0,4 % (Havlová et al., 2015; experimentální program). Hodnoty konzervativních D_e byly získány za předpokladu $0,1 \cdot D_e(\text{realistické})$

Radionuklid	D_e ($m^2 s^{-1}$) Realistické	D_e ($m^2 s^{-1}$) Konzervativní
Ag	$2,2 \cdot 10^{-13}$	$2,2 \cdot 10^{-14}$
Am	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$
Be	$2,4 \cdot 10^{-14}$ (Skagius et al., 1999)	$2,4 \cdot 10^{-15}$
C	$1,6 \cdot 10^{-14}$	$1,6 \cdot 10^{-15}$
Cl	$2,6 \cdot 10^{-14}$	$2,6 \cdot 10^{-15}$
Cm	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$
Cs	$2,13 \cdot 10^{-12}$	$2,13 \cdot 10^{-13}$
Ho	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$
I	$2,6 \cdot 10^{-14}$	$2,6 \cdot 10^{-15}$
Mo	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$
Nb	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$
Ni	$8,8 \cdot 10^{-14}$	$8,8 \cdot 10^{-15}$
Np	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$
Pa	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$
Pd	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$
Pu	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$
Se	$1,64 \cdot 10^{-13}$	$1,64 \cdot 10^{-14}$
Sm	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$
Sn	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$
Sr	$1,02 \cdot 10^{-12}$	$1,02 \cdot 10^{-13}$
Tc	$2,6 \cdot 10^{-14}$	$2,6 \cdot 10^{-15}$
Th	$1,9 \cdot 10^{-14}$	$1,9 \cdot 10^{-15}$
U	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$
Zr	$1,29 \cdot 10^{-13}$	$1,29 \cdot 10^{-14}$

Srovnání středních hodnot souboru dat pro D_e ($\cdot 10^{-12}$; $m^2 s^{-1}$) pro ^{36}Cl a ^{125}I z experimentálního programu (Příloha 1) a z přepočtených hodnot (0,58 vers. 0,26; 0,38 vers. 0,26; Příloha 2) vykazují velmi dobrou shodu a potvrzují správnost úvahy pro převzetí dat.

Pro získání souboru dat pro více radionuklidů na podkladu experimentálních výsledků by bylo nutno experimentální program výrazně rozšířit.

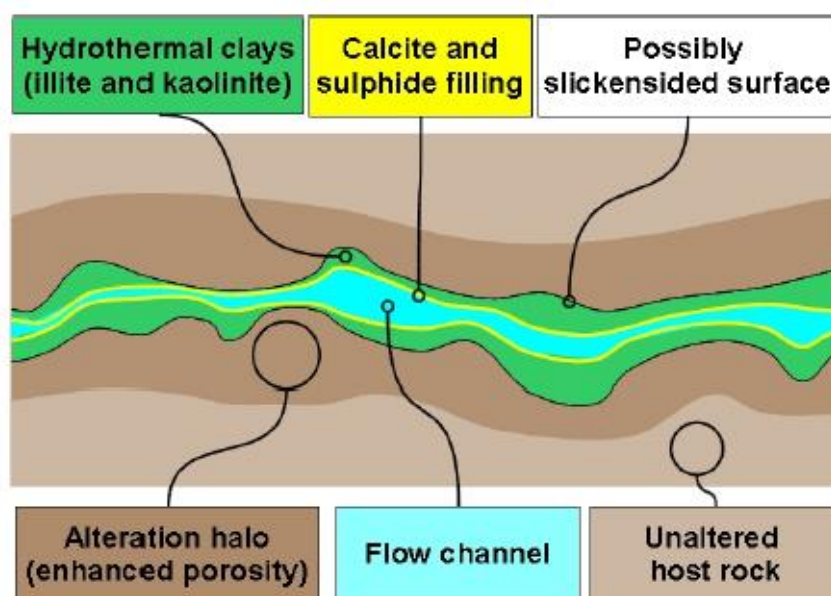
Finský přístup k této problematice je poněkud odlišný. Vychází z pojetí transportních cest a jejich popisu. Tomuto fenoménu byla pozornost věnována ve zprávě Havlová et al. (2015b). Posiva klasifikuje pukliny, v nichž dochází k transportu podle jednotlivých transportních tříd (Posiva Oy, 2012). Tyto třídy charakterizují pukliny na základě geologických a transportních vlastností a jsou zahrnuté do databáze DFN modelu. Pukliny se liší ve svých charakteristikách (tloušťka, porozita, efektivní difúzní koeficient a pokrytí minerály) a jsou rozděleny podle hlavních minerálů identifikovaných na jejich vnitřním povrchu při

geologickém mapování ve vrtech (viz Obr. 1). Podle nich jsou puklinám přiřazeny jednotlivé transportní třídy:

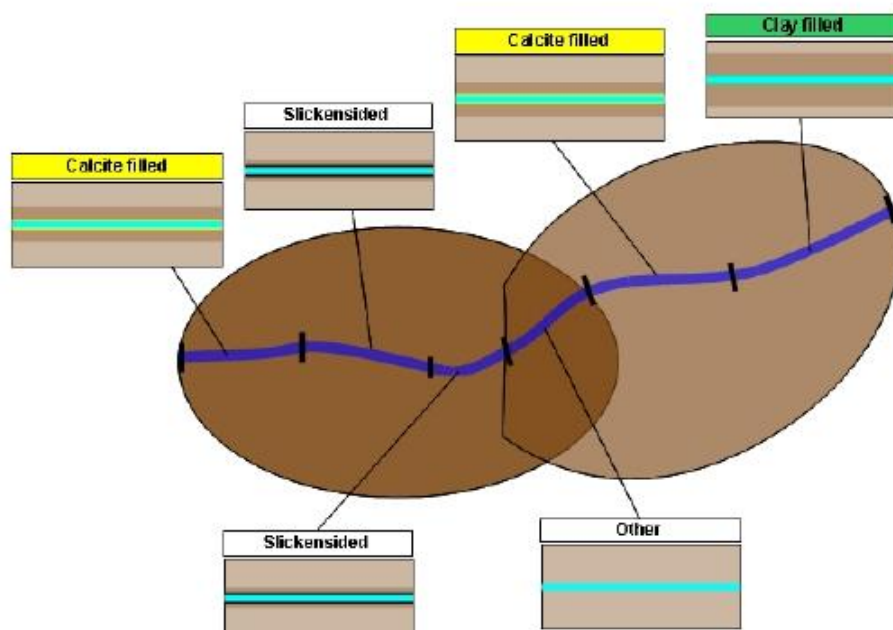
- **TC2** – pukliny, jejichž povrch je pokryt kalcitem nebo dolomitem,
- **TC3** – pukliny pokryté jílovými minerály (kaolinit, illit, montmorillonit, smektit),
- **TC4** – ostatní pukliny (puklinové zóny ve zvětralé hornině, jednotlivé zlomy, smykové zóny, ale také pukliny pokryté lehkými minerály – tzv. slickensided pukliny),
- **TC1** – všechny ostatní pukliny, které nelze zařadit do tříd TC2-TC4 (např. pukliny, které jsou pokryty více minerály, případně pukliny, jejichž charakteristiky je obtížné reprezentovat jednou imobilní zónou).

Lokální transportní třídy se mohou měnit i podél jednotlivé pukliny, která je součástí transportní cesty, viz Obr. 2. Každý typ výplně se pak skládá ze 3 částí - puklinové výplně samotné, alteračního halo a neporušené horniny.

Ke každé transportní třídě pak přiřazují charakteristické hodnoty parametrů, které platí pro všechny radionuklidy. Pro základní transportní třídy jsou některé parametry uvedeny v Tab. 4.



Obr. 1 Zobecněný konceptuální model pukliny pro lokalitu Olkiluoto (Posiva Oy, 2012)



Obr. 2 Realizace úseku transportní cesty. Jednotlivým segmentům jsou přiřazeny transportní třídy dle určených pravděpodobností. Lokální transportní třídy se podél transportních cest mohou měnit (Posiva Oy, 2012)

Tab. 4 Hodnoty efektivních difúzních koeficientů pro jednotlivé transportní třídy a jejich konstituenty (Posiva Oy 2013)

Transportní třída	Typ výplně	D_e ($m^2 s^{-1}$)		
		Puklinová výplň	Alterační halo	Neporušená hornina
TC2	Kalcit/dolomit	$1 \cdot 10^{-12}$	$7 \cdot 10^{-13}$	$6 \cdot 10^{-14}$
TC3	Jílové minerály	$1 \cdot 10^{-12}$	$3 \cdot 10^{-13}$	$6 \cdot 10^{-14}$
TC4	Slickensided fractures	$1 \cdot 10^{-13}$	$7 \cdot 10^{-12}$	$6 \cdot 10^{-14}$
TC1	Ostatní			$6 \cdot 10^{-14}$

Při srovnání hodnot pro neporušenou horninu je zřejmý konzervativní přístup k difúzi do horninové matrice. I z toho je patrné, že pro bezpečnostní výpočty by bylo vhodné použít hodnoty D_e konzervativní tak, jak jsou uvedeny v Tab. 3.

V průběhu dalších prací budou zrevidovány hodnoty D_w jednotlivých radionuklidů (v závislosti na dostupnosti samozřejmě) a použity pro realističtější přístup, stejně tak jako zpřesněná hodnota $D_e(\text{HTO})$, vycházející z probíhajícího experimentálního programu.

6 Vlastnosti horniny, ovlivňující transport radionuklidů

6.1 Porozita ϵ

V práci Havlové et al. (2015a) bylo provedeno vyhodnocení dostupných hodnot porozity pro horniny Českého masivu. Byl posouzen soubor 71 vzorků granitických hornin z vrtů bez extrémních vzorků (např. Cínovec s porozitou mezi 1,5 % až 4,9 %). V tomto souboru se hodnoty porozity pohybovaly v rozsahu od 0,23 až 2,7 % se střední hodnotou 0,63 %.

Tento soubor byl doplněn na 127 vzorků o vzorky z lokalit Čertovka (Tis u Blatna), Pozdřátky (Horka), Panské Dubénky (Březový potok) a PVP Bukov. Hodnoty porozit se v tomto souboru porozity pohybovaly v rozsahu od 0,13 až 2,7 % se střední hodnotou 0,5 %. Tento údaj se shoduje s hodnotou, použitou pro reprezentaci porozity pro hodnocení bezpečnosti v Aktualizaci referenčního projektu 2011. Pokud vybereme hodnoty pouze pro potenciální lokality, pro které jsou a budou dostupné i hodnoty z difúzních experimentů, pak medián hodnoty porozity dosahuje hodnoty 0,4 % s rozpětím souboru dat 0,14-1,29 %,

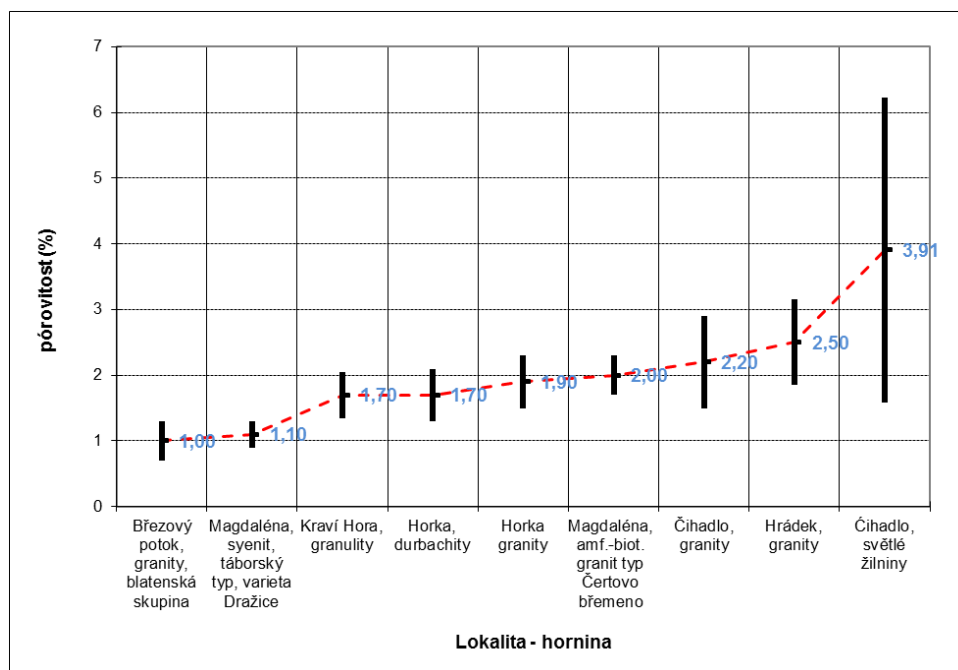
Kromě toho byly hodnoty porozity ve velkém datovém souboru hodnoceny pro granitické horniny Českého masivu v rámci zpráv Klomínský a Jarchovský (2008), Hanák a Ulrich (2009) a Havlová et al. (2009). V tomto případě však byly horniny hodnoceny spíše podle příslušnosti k jednotlivým horninovým masivům. Velká část vzorků byla povrchového původu a jen malá část pocházela z vrtných jader. Závěr z této práce prezentoval, že pórovitost granitických hornin Českého masivu se pohybuje v rozmezí 1,77-2,82 %. Tyto hodnoty jsou vyšší než hodnoty často udávané pro pórovitost horninové matrice v hloubce na úrovni HÚ RAO.

Kromě toho Hanák (2015) ve zprávě zpracoval data pro pórovitost, objemovou hustotu a magnetickou susceptibilitu pro každou z lokalit a různé horniny. Jeho výsledky lze shrnout do následující tabulky, kde jsou vybrány hodnoty pro granitické horniny. Výsledky jsou shrnuty na obrázku Obr. 3, kde je jasně patrný rozptyl hodnot. Obdobně jako u výše zmíněné práce Klomínského a Jarchovského (2008) a Hanáka a Ulricha (2009) zde vycházejí hodnoty porozity vyšší. Příčinou je především použití povrchových vzorků pro stanovení hodnot, jež mohou pocházet z menších hloubek a podléhat zvětrávání.

S přihlédnutím k těmto výsledkům doporučujeme konzervativně použít hodnotu porozity 0,4 %.

Doporučená hodnota: 0,4 %

Zdroj: statistické vyhodnocení souboru vzorků hornin z lokalit Čertovka, Horka, Březový potok a PVP Bukov (Příloha 1)



Obr. 3 Schéma relací pórovitosti intruzív a granulitů podle průzkumných lokalit HÚ (aritmetický průměr ± 1/2 směrodatná odchylka); Hanák (2015)

6.2 Hustota hornin ρ

V práci Havlové et al. (2015a) nebyly vyhodnoceny hodnoty pro hustotu horniny (více méně se shoduje s pojmem objemová hustota u Hanáka, 2016).

Hanák (2015) vyhodnotil mineralogickou hustotu D_m , tj. hustotu pevné fáze horniny bez pórů a jejich výplní, pro všechny lokality. Z výsledné tabulky pro granity je zjevné, že u *hodnocených* hornin existuje „skok“ mezi běžnými granity ($2641\text{--}2666\text{ kg m}^{-3}$) a granodiority blatenské skupiny, durbachity a granity typu Čertova břemene ($2742\text{--}2768\text{ g cm}^{-3}$). V Hanákově souboru nejsou zahrnuty vzorky z lokality PVP Bukov, které mají obecně vyšší hustotu.

Tab. 5 Výsledky t -testu vzájemné odlišnosti aritmetických průměrů (%) intruzív + granulitů u Stržiteže, mineralogická hustota (Hanák, 2016). AM = aritmetický průměr

lokalita, hornina	AM (g cm^{-3})	SD	N	Čihadlo, granity	Hrádek, granity	Horka granity	Čihadlo, světlé žilniny	Kraví Hora, granulity	Březový potok, granity, blatenská skupina	Horka, durbachity	Magdaléna, amf.-biot. granit typ Čertovo břemeno
Čihadlo, granity	2,641	0,013	25	x							
Hrádek, granity	2,647	0,007	10	79,2	x						
Horka granity	2,653	0,028	28	94,6	70,5	x					
Čihadlo, světlé žilniny	2,664	0,008	7	99,9	99,9	93,6	x				
Kraví Hora, granulity	2,666	0,028	21	99,9	99,5	90,2	21,4	x			
Březový potok, granity, blatenská skupina	2,742	0,043	26	99,9	99,9	99,9	99,9	99,9	x		
Horka, durbachity	2,747	0,060	86	99,9	99,9	99,9	99,9	99,9	41,5	x	
Magdaléna, amf.-biot. granit typ Čertovo břemeno	2,754	0,016	10	99,9	99,9	99,9	99,9	99,9	77,1	54,5	x
Magdaléna, tábořský typ, syenit varieta Dražice	2,768	0,004	5	99,9	99,9	99,9	99,9	99,9	99,4	99,6	97,1

Z tohoto důvodu byl vyhodnocen alespoň neúplný soubor dat pro horniny z lokalit Čertovka, Horka, Březový potok a PVP Bukov (58 vzorků) - viz Appendix 2. Hustota vzorků se pohybuje od 2604 kg m^{-3} až po maximum 2995 kg m^{-3} se střední hodnotou 2774 kg m^{-3} .

S přihlédnutím k výše uvedeným výsledkům navrhuje použít hodnotu 2700 kg m^{-3} pro hustotu granitických hornin z Českého masivu.

Doporučená hodnota: 2700 kg m^{-3}

Zdroj: statistické vyhodnocení souboru 58 vzorků hornin z lokalit Čertovka, Horka, Březový potok a PVP Bukov

6.3 Vyhodnocení hodnot formačního faktoru F_f pro horniny Českého masivu

Jak už bylo řečeno ve zprávě Havlová et al. (2015), formační faktor F_f je zcela závislý na vlastnostech horninové matrice. Jeho účelem je popsat a určitým způsobem generalizovat vlastnosti horniny, jež ovlivňují difúzi. Současně byly publikovány postupy využívající elektrochemické metody, a to jak v laboratoři, tak in-situ (Löfgren a Neretnieks, 2002; 2006).

V daném případě byl zpracován soubor 41 hodnot pro horniny z potenciálních lokalit, pro které se hodnota F_f pohybuje v intervalu $4,9 \cdot 10^{-5}$ - $1,7 \cdot 10^{-3}$ se střední hodnotou $3,4 \cdot 10^{-4}$.

Doporučená hodnota: $3,4 \cdot 10^{-4}$

Zdroj: statistické vyhodnocení souboru 41 vzorků hornin z lokalit Čertovka, Horka, Březový potok a PVP Bukov (Příloha 1)

6.4 Vzdálenost, do níž je hornina v rovnováze s podzemní vodou v puklině δ

Tento parametr byl hodnocen již ve zprávě Havlové et al. (2015a). Nebylo dosaženo žádné změny v přístupu a doporučujeme přijmout hodnotu, přijatou např. v práci Vokála et al. (2009) - **0,02 m pro sorbující se radionuklidy a 2 m pro nesorbující se radionuklidy**.

Doporučená hodnota: 0,02 m

Zdroj: Vokál et al. (2009)

6.5 Rozevření (apertura) pukliny a

Tento parametr byl hodnocen již ve zprávě Havlové et al. (2015a). Hodnotu tohoto parametru je bez znalosti a výzkumu konkrétní lokality možno pouze odhadovat, a to ještě velmi problematicky. Podle Hagros (2006) je puklina o šířce větší než 5 mm ze stavebního hlediska považována pro výstavbu úložiště za nevhodnou, a to i přesto, že puklina, na níž dochází k významné erozi bentonitu, se považuje za významnou, až když přesáhne šířku 10 mm (Andersson et al. 2000).

Doporučujeme použít stejný přístup jako v práci Vokála et al. (2009), kdy byla zvolena poloviční vzdálenost rozevření pukliny a , tj. **0,0001 m**.

Doporučená hodnota: 0,0001 m

Zdroj: Vokál et al. (2009)

6.6 Flow wetted surface (smáčený povrch)

Smáčený povrch pukliny představuje jeden z nejzákladnějších parametrů, který je zohledňován při popisu transportu radionuklidů v horninovém prostředí. Označuje se jako „smáčená plocha povrchu na jednotku objemu mobilního roztoku“ nebo jako „specifická plocha kontaktu“. Obojí označuje tu část povrchu, která zůstává v kontaktu s mobilním roztokem a kde může dojít k transportu hmoty mezi puklinou a nemobilním (stagnujícím) roztokem v horninové matici. Pro zjednodušení: pokud proudění probíhá v puklině o šířce $2b$, pak hodnota specifického kontaktního povrchu je $1/b$ (Jakob, 2004).

Např. Ohlsson a Neretnieks (1995) ukázali, že minerální výplň puklin, byť mm silná, nemusí nutně ovlivnit difúzi z pukliny do horniny, neboť v porovnání s horninovou maticí mají často tyto minerály větší povrch. Měření na vrtných jádrech, vyhodnocením autoradiogramů vzorků impregnovaných aktivní pryskyřicí (PMMA) nebo nepřímo vyhodnocením komplexních stopovacích experimentů můžeme získat informace o smáčeném povrchu, avšak jsou nutné i další informace o difúzních koeficientech a sorpční kapacitě tak, aby byla eliminována míra nejistot při těchto aproximacích.

Advektivní transport závisí především na vlastnostech horniny, tedy na četnosti a velikosti puklin, jejich rozměrech (tedy i na smáčeném specifickém povrchu), otevřenosti/puklinové výplni, hydraulické konduktivitě, kinematické porozitě, a dále na parametrech proudění podzemní vody, tj. rychlosti proudění, regionálních a lokálních hydraulických gradientech.

6.7 Složení vod v horninovém masivu granitických hornin

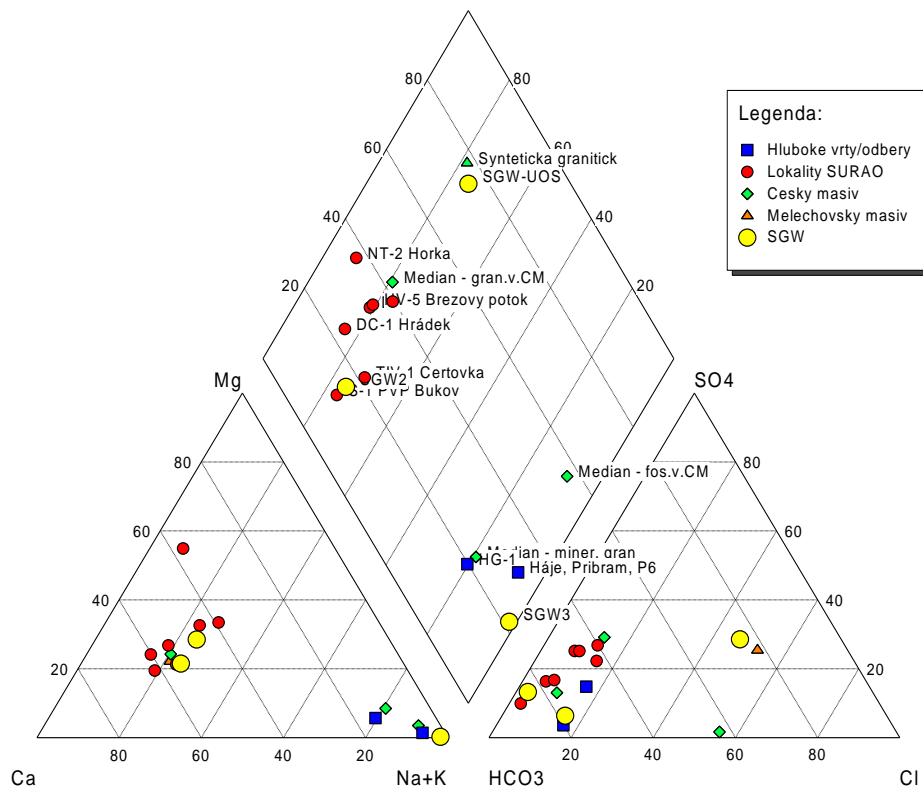
Základní vlastnosti vod granitických masivů a potenciálních lokalit byly vyhodnoceny ve zprávách Havlová et al. (2015) a Červinka et al. (2016)

Znalost složení podzemní vody je elementárním vstupem pro mnoho oblastí bezpečnosti HÚ. V prvních českých experimentálních pracích se vycházelo z průměrného složení podzemní vody z Melechovského masivu (Buňatová et al., 1995) nebo referenční podzemní vody z lokality Příbram (Háje, podzemní zásobník plynu). Komplexnější zhodnocení a přehled složení podzemních vod Českého masivu provedla Rukavičková et al. (2009). Dle dostupných analýz byly vody rozděleny na tři typy, jednak podzemní vody z granitů z hloubek větších než 30 m, dále na vody fosilní a vody minerální ovlivněné příronem hlubinného CO_2 . Chemickým složením podzemních vod na konkrétních potenciálních lokalitách se zabývala Havlová et al. (2015a). Základní chemické složení vybraných podzemních vod, které se používají pro přípravu syntetické podzemní vody, nebo jsou doporučeny jako referenční vody, jsou uvedeny v Tab. 6.

Tab. 6 Základní chemické složení podzemních vod 1) Melechovský masiv – průměr, příprava SGW (Buřatová et al., 1995), 2) Lokalita Háje u Příbrami, podzemní zásobník plynu, vývěr P-6, roky 1990-1996 – průměr, 3) Český masiv - medián (Rukavičková et al., 2009), 4) Český masiv, minerální vody - medián (Rukavičková et al., 2009), 5) Český masiv, fosilní vody - medián (Rukavičková et al., 2009), 6) Jáchymov, pramen Běhounek, vrt HG-1, 7) Lokalita Čertovka, vrt TIV-1 (Havlová et al., 2015), 8) Lokalita Magdaléna, vrt N-2 (Havlová et al., 2015), 9) Lokalita Horka, vrt NT-2 (Havlová et al., 2015), 10) Lokalita Čihadlo, vrt DE-2 (Havlová et al., 2015), 11) Lokalita Březový potok, vrt HV-5 (Havlová et al., 2015), 12) Lokalita Hrádek, vrt DC-1 (Havlová et al., 2015), 13) Lokalita Kraví Hora, vrt S-1, PVP Bukov (Havlová et al. 2015), 14) PVP Bukov (600 m) – průměr, příprava SGW2 , 15) Důl Rožná (1000 m) – průměr, příprava SGW3

č.	Hloubka (m)	pH	I (mol l ⁻¹)	Na (mg l ⁻¹)	K (mg l ⁻¹)	Ca (mg l ⁻¹)	Mg (mg l ⁻¹)	Cl (mg l ⁻¹)	HCO ₃ (mg l ⁻¹)	SO ₄ (mg l ⁻¹)	TDS (mg l ⁻¹)	Bilance kat/an %
1	-	8,3	0,003	10,6	1,8	27,0	6,4	42,4	30,4	27,7	152,8	0,0
2	900	9,1	0,002	75,9	0,5	3,9	0,6	14,9	137,6	18,3	114,1	0,1
3	-	-	0,003	11,4	2,3	30,1	8,0	11,7	85,4	34,1	183,0	5,3
4	-	-	0,020	501,5	25,5	60,9	28,7	92,6	1220,5	162,5	2092,2	3,5
5	-	-	0,020	1050,0	52,5	55,9	22,0	644,0	863,0	26,3	2713,7	22,2
6	-	-	0,006	141,0	8,5	23,6	5,5	52,4	442,0	15,6	690,0	-6,3
7	100	6,7	0,003	7,2	9,2	15,6	8,1	4,3	100,7	16,6	161,8	-3,1
8	70	7,5	0,004	12,5	3,6	24,1	10,8	12,1	95,8	33,6	203,7	2,1
9	80	7,9	0,006	5,1	4,2	30,0	27,0	20,0	143,0	40,0	286,0	0,3
10	80	6,9	0,004	10,7	1,5	29,6	8,8	8,2	112,9	33,6	213,0	-1,5
11	60	7	0,005	14,0	2,5	43,8	8,4	13,6	162,0	49,0	293,6	-6,8
12	90	7	0,003	6,5	1,7	25,1	6,1	5,3	91,5	15,9	170,4	0,6
13	600	8,6	0,004	14,7	2,5	33,6	7,8	2,9	155,6	13,9	264,8	1,4
14	600	8,2	0,004	16,5	2,1	34,6	8,3	3,3	168,7	21,0	287,5	-1,7
15	1000	9,2	0,004	89,4	0,7	1,3	0,1	18,7	163,5	10,5	319,3	0,4

Základní chemické složení podzemních vod z Tab. 6 bylo vyneseno do Piperova diagramu (viz Obr. 4). Zjednodušeně lze říci, že pro podzemní vody z potenciálních lokalit HÚ (hloubky odběru do 100 m, výjimka je PVP Bukov s hloubkou odběru 600 m) je dominantní složení Ca-Mg-HCO₃. Velmi dobře tomu odpovídá i medián podzemní vody z granitů Českého masivu obdobné hloubky. Průměrné složení vod Melechovského masivu, které je používáno pro přípravu syntetické granitické vody (ÚJV), se odlišuje zvýšeným obsahem chloridů. Generickým zástupcem je průměrné složení podzemní vody z PVP Bukov (600 m) označené jako SGW2. Hlubší podzemní vody, které jsou reprezentované souborem analýz z podzemního zásobníku plynu Háje (Příbram), analýzou pramene Běhounek (vrt HG-1, Jáchymov) a mediánem fosilních a minerálních vod z Českého masivu, se odlišují výrazným obsahem Na s dominantním aniontem HCO₃⁻ či Cl⁻. Je pravděpodobné, že s narůstající hloubkou se bude obsah sodíku v podzemních vodách zvyšovat, nicméně tomuto trendu například neodpovídá analýza z PVP Bukov z hloubek okolo 600 m. Generickým zástupcem je průměrné složení podzemní vody z dolu Rožná (1000 m), označené jako SGW3.



Obr. 4 Piperův diagram složení podzemních vod

Hlubkový interval přechodu podzemní vody z typu Ca-HCO_3 na Na-HCO_3 není přesně znám a to zejména proto, že není dostatek analýz podzemních vod z hlubších horizontů odpovídající plánované hloubce HÚ (500 m) jak z uvažovaných lokalit, tak z uvažovaných krystalických hornin (zejména granitické plutony). Vysvětlení nedostatku analýz podzemních vod je vcelku prosté, granitické plutony jsou homogenní horniny s velkým hlubkovým dosahem, které jsou všeobecně pro geologický výzkum málo zajímavé. Při současném stavu znalostí a dostupnosti dat se jeví jako velmi praktické připravit dvě generické syntetické podzemní vody. Jednu odpovídající typu Ca-HCO_3 a druhou Na-HCO_3 tak, aby byly pokryty oba zásadní typy vod. Tyto vody by byly reprezentativní pro všechny lokality, přestože drobné odchylky v chemickém složení najít mezi lokalitami můžeme. Např. lokalita Horka se vyznačuje vyšším obsahem hořčíku. Nicméně tyto odlišnosti v chemickém složení jednotlivých lokalit by neměly mít podstatný vliv na sledované procesy a získané hodnoty pro bezpečnostní rozbor. Na základě odborné diskuse (proběhla 2. 3. 2016 na SÚRAO) byly pro přípravu obou základních typů vod vybrány analýzy z PVP Bukov a dolu Rožná, které se nacházejí v blízkosti lokality Kraví hora. Tyto vody byly zvoleny jako referenční vody pro další experimentální a modelové práce

SGW2 – vychází z analýz podzemní vody na podzemním výzkumném pracovišti Bukov (PVP Bukov, jižní křídlo uranového dolu Rožná, 12p. cca 600 m pod povrchem). Svým složením reprezentuje mělký oběh podzemních vod v puklinovém prostředí krystalických hornin Českého masivu, typ Ca-HCO_3 (Červinka et al., 2016).

SGW3 – vychází z analýz podzemní vody na dole Rožná (22-24p. cca 1000 m pod povrchem). Svým složením reprezentuje hluboký oběh podzemních vod v puklinovém prostředí krystalických hornin Českého masivu, typ Na-HCO_3 . (Červinka et al., 2016).

Tab. 7 Navržené chemické složení podzemní vody SGW2 a SGW3 na základě reálných analýz podzemních vod z PVP Bukov a dolu Rožná

Voda	pH	mg/l								TYP	meq/l		Balance
		Na ⁺	K ⁺	Ca ²⁺	Mg ²⁺	F ⁻	Cl ⁻	SO ₄ ²⁻	HCO ₃ ⁻		Kat.	An.	
SGW2	8,2	16,5	2,1	34,6	8,3	-	3,3	21,0	168,7	Ca- HCO ₃	3,18	3,32	-2,10 %
SGW3	9,2	89,4	0,7	1,3	0,1	9,9	18,7	10,5	163,5	Na- HCO ₃	3,98	3,95	0,40 %

Poznámka: u SGW2 je možné rozdíl bilance kompenzovat snížením koncentrace síranů, u SGW3 snížením koncentrace sodíku

7 Závěr

V této zprávě jsou metodou expertního výběru navrženy hodnoty migračních parametrů pro hodnoty sorpčního koeficientu K_d a efektivního difúzního koeficientu D_e pro relevantní radionuklidy v prostředí podzemních vod Českého masivu, dále hodnoty porozity pro granitické horniny Českého masivu, hustoty hornin, parametry pukliny a vyhodnocení generelního složení podzemních vod v Českém masivu.

Hodnoty sorpčních koeficientů byly vyhodnoceny jednak na základě literárních dat, především ze skandinávského programu, jednak na základě výsledků experimentálního programu pro horniny potenciálních lokalit. Vždy byla brána v úvahu specifika horninového prostředí Českého masivu, a to menší iontová síla podzemní vody a převážně Ca-HCO₃ charakter jejího složení.

U hodnot, charakterizujících proces difúze bylo přihlédnuto k nedostatku experimentálních dat, a hodnoty byly převzaty jednoduchým přepočtem z literatury s přihlédnutím k vlastnostem hornin Českého masivu. Dalším významným zdrojem nejistoty jsou hodnoty difúzních koeficientů ve volné vodě (D_w), které jsou pro některé radionuklidy pouze odhadovány.

Doporučené hodnoty porozity, hustoty hornin a složení podzemních vod vycházejí z reálných hodnot naměřených pro prostředí hornin a podzemních vod Českého masivu.

Pro doplnění souborů relevantními daty by bylo nutno provést rozsáhlejší experimentální výzkum difúzních a sorpčních procesů s radionuklidy, které jsou relevantní pro hodnocení bezpečnosti, a to např. sorbujícími se nuklidy ⁷⁵Se, U a aktinidy (nebo jejich homology), nejlépe za podmínek, které se co nejvíce blíží podmínkám hlubinného úložiště (vzorky hornin, odpovídající podzemní voda, vhodně zvolená forma stopovače, případně anaerobní podmínky, pokud to bude možné).

Některé parametry jako je např. rozevření pukliny, smáčený povrch apod. byly převzaty ze starších prací, neboť o nich nebyly v uplynulém období získány žádné další podněty.

Experimentální program, spojený s tímto úkolem, stále pokračuje. Data z něho získaná budou zařazena do výsledné databáze a odrazí se i v případné revizi navržených hodnot transportních parametrů pro bezpečnostní výpočty.

8 Literatura

- ALBINSSON Y. (1991): Sorption of radionuclides in granitic rock. - SKB Arbetsrapport AR 91-07, Stockholm, Sweden.
- ALDAHAN A., HAIPIN YY. POSSNERT G. (1999): Distribution of beryllium between solution and minerals _biotite and albite/ under atmospheric conditions and variable pH. - Chemical Geology 156, 209 - 229.
- ANDERSSON J., STROM A., ALMÉN K. E. A ERICKSSON, E. (2000): What requirements does the KBS-3 repository make on the host rock. - SKB Technical Report TR 00-12 - SKB, Stockholm, Sweden.
- ANDERSSON K.; ALLARD B. (1983): Sorption of radionuclides on geologic media – A literature survey. I: Fission Products. - SKB TR-83-07, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden.
- ANDERSSON K.; TORSTENFELT B.; ALLARD B. (1983): Sorption of radionuclides in geologic systems. - SKB TR-83-07, Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden.
- BAES C.F. A MESMER R.E. (2009): The hydrolysis of cations. - Krieger publishing company, Makabar, Florida.
- BASCETIN E.; ATUN G. (2006): Adsorption behavior of strontium on binary mineral mixtures of Montmorillonite and Kaolinite. - Applied Radioation and Isotopes, 64, 957-964.
- BROOKINS D.G. (1988). Eh-pH Diagrams for Geochemistry. - NewYork: Spring-Verlag,1–176.
- Buňatová V., Jelínek E., Kučera J., Řanda Z. (1995): Interakce štěpných produktů s horninami. - Zpráva grantu GA ČR 205/93/0702. PŘF UK Praha.
- BYEGARD M., JOHANSSON H., SKALLBERG M., TULLBORG E. L. (1998): The interaction of sorbing and non-sorbing tracers with different Äspö rock types. Sorption and diffusion experiments in the laboratory scale. - SKB Technical Report TR 98-18, Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB), Stockholm, Sweden.
- CARBOL P., ENKVIST I. (1997): Compilation of radionuclide sorption coefficients for performance assessment. - SKB Report R 97-13, Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB), Stockholm, Sweden.
- CORNELL R. M. (1993): Adsorption of cesium on minerals: A review. - Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 171, 483-500, Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB), Stockholm, Sweden.
- ČERVINKA R. A GONDOLLI (2016): Výběr reprezentativních podzemních vod a příprava jejich syntetických ekvivalentů. - TZ 41/2016. SÚRAO Praha, 122 str.
- ČERVINKA R., HAVLOVÁ V., VIDENSKÁ K., PALÁGYI Š., VECERNÍK P., ŠTAMBERG K., VOPÁLKA D., HOFMANOVÁ E., VAŠÍNOVÁ GALIOVÁ M., HAVRÁNEK V. (2012): Výzkum a vývoj metodik hodnocení interakce radionuklidu s horninovým prostředím (FR-T11/362) – Zpráva ÚJV Řež, a. s., ÚJV 13819, 143 str.
- DIBB. J.E., RICE D.L. (1989): The partitioning of Beryllium-7 in Chesapeake Bay. - Estuarine, Coastal and Shelf Science, 379 - 394.
- DURO, L., GRIVE, M., CERA, E., DOMENECH, C., BRUNO, J. (2006): Update of a thermodynamic database for radionuclides to assist solubility limits calculations for PA.Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co, Stockholm, Sweden. - Report SKBTR 06-17.
- ENRESA (1997). Evaluación del compartimiento y de la seguridad de un almacenamiento profundo en arcilla. - Publicación Tecnica, 03-99.
- FOUREST, B., PERRONE, J., TARAPCIK, P., GIFFAUT, E., 2004. The hydrolysis of protactinium (V) studied by capillary diffusion. - J. Solution Chem., 33(2004) 95–973.

- HAGROS A. (2006): Host Rock Classification (HRC) System for Nuclear Waste Disposal in Crystalline Bedrock. Doctoral Thesis. - University of Helsinki, Department of Geology. .
- HAKANEN M., ERVANNE H., PUUKKO E. (2012): Safety Case for the Disposal of Spent Nuclear Fuel at Olkiluoto - Radionuclide Migration Parameters for the Geosphere. Posiva Report POSIA 2012 - 41. - Posiva Oy, Eurojaki, Finland.
- HANÁK J., ONDRA P. (2015) Rešerše petrofyzikálních dat pro průzkumná území HÚ. - TZ SÚRAO 2015.
- HANÁK J., ULRICH S. (2009): Expertní odhad tektonických, fyzikálních a geomechanických vlastností masivu. - Dílčí závěrečná zpráva č. 3.2. Příloha Průběžná technické zprávy č. 4 projektu Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů, sdružení Geobariéra. - Registrační číslo Geofondu 1291/2007 z 1.6.2007.
- HAVLOVÁ V., HANÁK J., VEJSADA J., VOKÁL A., ČERVINKA R., VEČERNÍK P. (2009): Expertní odhad dat nutných pro kvantifikaci migračních procesů zájmových radionuklidů v poli vzdálených interakcí. - Dílčí zpráva č. 3.2. Příloha Průběžná technické zprávy projektu Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů, sdružení Geobariéra. - Registrační číslo Geofondu 1291/2007 z 1.6.2007.
- HAVLOVÁ V., MILICKÝ M., UHLÍK J., KRÁLOVCOVÁ J. (2015b): Modely a výpočetní kódy pro určení transportních cest a hodnocení transportu radionuklidů přes horninové prostředí. TZ 16/2015. SÚRAO Praha.
- HAVLOVÁ V., VIDENSKÁ K., GONDOLLI J., MILICKÝ M., GVOŽDÍK L., KRÁLOVCOVÁ J., RUKAVIČKOVÁ L. (2015a): Migrační procesy radionuklidů v prostředí krystalických hornin a migrační parametry hornin Českého masivu. TZ 13/2015. SÚRAO Praha, 122 str.
- HAWLEY N., ROBBINS J. A., EADIE B. J. (1986): The partitioning of Be-7 in fresh water. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 50 (6), 1127 - 1131.
- HIGGO, J. J. V. (1988): Review of Sorptional Data Applicable to the Geological Environments of Interest for the Deep Disposal of ILW and LLW in the UK. Safety Studies. - NSS/R162, AEA Technology, Harwell, UK.
- CHOPPIN G, RYDBERG J, LILJENZIN J-O (1995): Radiochemistry and nuclear chemistry. - Butterworth-Heinemann, Oxford, England
- JAKOB, A. (2004): Matrix diffusion for performance assessment - experimental evidence, modelling assumptions and open issues. PSI Report Nr. 04-08. – NAGRA, Switzerland.
- JUNG J.; LEE J. K.; HANH P. S. (2001): Development and application of a sorption data base for the performance assessment of a radwaste repository. - *Waste Management*, 21, 363-369.
- Klajmon M. Výpočet rozpustnosti radionuklidů v podmínkách podzemních vod Českého masivu 2016. Předloženo SÚRAO ke schválení. - TZ XX/2016. SÚRAO Praha
- Klomínský J., Jarchovský T. (2008): Expertní odhad geologických parametrů. Dílčí závěrečná zpráva 3.1. Projekt Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů. - Sdružení G-Bariéra pro SÚRAO, 2008.
- KULMALA T., HAKANEN M., LINDBERG A. (1996): Sorption of protactinium on rocks from Posiva investigation sites. - Posiva Report 96-18. Posiva Oy, Helsinki, Finland..
- KÜTAHYALI C; ÇEINKAYA B; BAHADIR ACAR M.; IŞIK N. O.; CIRELI İ. (2012): Investigation of strontium sorption onto Kula volcanic using Central Composite Design. - *Journal of Hazardous Materials*, 201–202, 115–124.

- LANGMUIR D. L. (1978): Uranium Solution-Mineral equilibria at temperatures with applications to sedimentary ore deposits. - *Geochimica et Cosmochimica Acta*, Vol. 42, 547 - 569.
- LINDGREN M., LINDSTRÖM F. (1999): SR 97 Radionuclide transport calculations. - Technical Report TR 99-23, Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB), Stockholm, Sweden.
- MISSANA T.; BENEDICTO A.; GARCÍA-GUTIÉRREZ M.; ALONSO U. (2014): Modeling cesium retention onto Na-, K- and Ca-smectite: Effects of ionic strength, exchange and competing cations on the determination of selectivity coefficients. - *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 128, 266-277.
- OHLSSONS Y., NERETNIKS I. (1997): Diffusion data in granite. Recommended values. - SKB Technical report TR 97-20. - SKB, Stockholm, Sweden.
- PAGES T. (1969): Chemical equilibria and zoning of subsurface water from Jachymov ore deposit, Czechoslovakia. - *Geochimica et Cosmochimica Acta*, Vol. 33, 591 - 609.
- PALÁGYI Š., VODIČKOVÁ H. (2009): Sorption and desorption of $^{125}\text{I}^-$, $^{137}\text{Cs}^+$, $^{85}\text{Sr}^{2+}$ and $^{152,154}\text{Eu}^{3+}$ on disturbed soils under dynamic flow and static batch conditions. - *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 280, 3–14.
- PALÁGYI Š.; ŠTAMBERG K. (2010): Modeling of transport of radionuclides in beds of crushed crystalline rock under equilibrium non-linear sorption isotherm condition. *Radiochimica Acta*, 98, 359-365.
- PALÁGYI Š.; ŠTAMBERG K.; HAVLOVÁ V.; VODIČKOVÁ H. (2013): Effect of grain size on the $^{85}\text{Sr}^{2+}$ sorption and desorption in columns of crushed granite and infill materials from granitic water under dynamic conditions. - *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 297, 33-39.
- POSIVA OY (2012): Olkiluoto Site Description. Posiva report POSIVA 2011-02. 1029 s. – Posiva Oy, Eurajoki, Finland.
- POSIVA OY (2013): Safety Case for the Disposal of Spent Nuclear Fuel at Olkiluoto - Models and Data for the Repository System 2012. Posiva Report POSIA 2013 - 01. - Posiva Oy, Eurojaki, Finland.
- RUKAVIČKOVÁ L., PAČES T. HOLEČEK J. (2009): Expertní odhad hydraulických a hydrochemických parametrů. Dílčí závěrečná zpráva projektu. Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů. - Geobariéra, 2009.
- SÉBY F. (2001): A critical review of thermodynamic data for selenium species at 25C. - *Chemical Geology*, 171, 173-194.
- SKAGIUS K., PETTERSSON M., WIBORGH M., ALBINSSON Y., HOLGERSSON S. (1999): Compilation of data for the analysis of radionuclide migration from SFL 3-5. - SKB Technical Report TR 98-13, Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB), Stockholm, Sweden.
- SMITH P., NORDMAN H., PASTINA B., SNELLMANN M., HJERPE T., JOHNSON L. (2008): Safety assessment for KBS-3H spent nuclear fuel repository in Olkiluoto. - SKB Technical Report R-08-38, Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB), Stockholm, Sweden.
- ŠTAMBERG K.; PALÁGYI Š.; VIDENSKÁ K.; HAVLOVÁ V. (2014): Interaction of $^3\text{H}^+$ (as HTO) and $^{36}\text{Cl}^-$ (as Na^{36}Cl) with crushed granite and corresponding fracture infill material investigated in column experiments. - *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* 2014, 299, 1625-1633.
- TICKNOR K., KAMINENI D., VANDERGRAAF T. (1991): Flow Path Mineralogy: Its Effect on Radionuclide Retardation in the Geosphere. - *MRS Proceedings* 212, 661.
- TICKNOR K.V., MCMURRY J. (1996): A study of selenium and tin sorption on granite and goethite. - *Radiochimica acta* 73, 149-156.

- VIDENSKÁ K. (2014): Studium migrace biotoxických složek v životním prostředí. - Dizertační práce. VŠCHT, Praha, 2014.
- VIDENSKÁ K.; GONDOLLI J.; ŠTAMBERG K.; HAVLOVÁ V. (2015): Retention of selenium and caesium on crystalline rock: The effect of redox conditions and mineralogical composition. - Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry 2015, 304, 417-423.
- VIDENSKÁ K.; PALÁGYI Š.; ŠTAMBERG K.; VODIČKOVÁ H.; HAVLOVÁ V. (2013): Effect of grain size on the sorption and desorption of SeO_4^{2-} and SeO_3^{2-} in columns of crushed granite and fracture infill from granitic water under dynamic conditions. - Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry 2013, 298, 547-554.
- VINŠOVÁ H.; VEČERNÍK P.; JEDINÁKOVÁ-KŘÍŽOVÁ V. (2006): Sorption characteristics of ^{99}Tc onto bentonite material with different additives under anaerobic conditions. - Radiochimica Acta, 94, 435–440.
- VOKÁL A., HAVLOVÁ V., HERCÍK M., LANDA J., LUKIN D., VEJDASA J. (2009): Aktualizace referenčního projektu hlubinného úložiště radioaktivních odpadů v hypotetické lokalitě. I. etapa - Analýza vstupních předpokladů řešení. 2.dílní zpráva – Bezpečnostní aspekty a screeningové výpočty. - ÚJV Řež, a.s. pro SÚRAO.
- VUORINEN U., KULMALA S., HAKANEN M., AHONEN, L., CARLSSON T. (1998): Solubility database for TILA-99. - Posiva Oy, Finland.
- YOU C.F., LEE Y., LI Y. (1989): The partitioning of Be between soil and water. - Chemical Geology, 77, 105 - 118.
- ZACHARA J. M.; HEALD S. M.; BVONG-HUN J.; KUKKADAPU R. K.; LIU CH.; MCKINLEY J. P.; DOHNALKOVA A. C.; MOORE D. A. (2007): Reduction of pertechnetate [Tc(VII)] by aqueous Fe(II) and nature of solid phase redox products. - Geochimica et Cosmochimica Acta, 71, 2137-2157.

NAŠE BEZPEČNÁ BUDOUCNOST



SÚRAO

Správa úložišť radioaktivních odpadů

Dlážděná 6, 110 00 Praha 1

Tel.: 221 421 511, E-mail: info@surao.cz

www.surao.cz