

## Posudek oponenta doktorské disertační práce

**Autor:** Mgr. Lucie Baborová  
**Název:** Studium difúze Sr a Cs v kompaktovaném bentonitu  
**Instituce:** České vysoké učení technické v Praze  
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská  
Katedra jaderné chemie  
Studijní program: Aplikace přírodních věd  
Studijní obor: Jaderná chemie

**Oponent:** doc. RNDr. Josef Zeman, CSc.  
Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav geologických věd  
Kotlářská 2, 611 37 Brno  
e-mail: jzeman@sci.muni.cz, tel.: 549 498 295

Předkládaná doktorská disertační práce „Studium difúze Sr a Cs v kompaktovaném bentonitu“ má rozsah 191 číslovaných stran. Do textu je zařazeno 74 obrázků a 45 tabulek. Pro vypracování práce použila doktorandka 183 literárních pramenů. Práce obsahuje v příloze 4 tabulky doplňujících parametrů. Kromě toho je zařazen seznam impaktivních publikací, ve kterých je doktorandka hlavní autorkou (3, impaktní faktor 1,371–3,229), seznam abstraktů ve sbornících (7, u 5 je doktorandka první autorkou), seznam výzkumných zpráv, na jejichž zpracování se doktorandka podílela (9). Práce je doplněna seznamem použitých zkratk.

Doktorská disertační práce je zaměřena na řešení problému difúze stroncia a cesia v kompaktovaném bentonitu, který je součástí řešení širší problematiky budování hlubinného úložiště ozářeného jaderného paliva (vyhořelých palivových článků) a zejména zajištění požadovaných bezpečnostních parametrů. Téma práce je vysoce aktuální, protože sorpce a mobilizace radionuklidů v horninovém prostředí a inženýrských bariérách patří mezi nejdůležitější bezpečnostní parametry hlubinného úložiště.

V *Úvodu* doktorandka uvádí čtenáře do řešené problematiky a formuluje cíle práce, uvádí základní údaje o interakci rozpuštěných látek s pevnými povrchy a věnuje se problematice difúzního transportu v kompaktovaném bentonitu. V kapitole *Materiály a metody* charakterizuje vlastnosti bentonitu a jeho geochemické a fyzikální parametry, které jsou významné pro další řešení problému. Dále následuje popis provedení vsádkových a difúzních experimentů. Značná část obsahu této kapitoly je věnována rozvoji metodiky modelování a vyhodnocování difúzních experimentů. Doktorandka využila pro řešení tématu osvědčené metody zjišťování potřebných parametrů, byly však vyvinuty a užity i nové metody a způsoby vyhodnocení získaných dat.

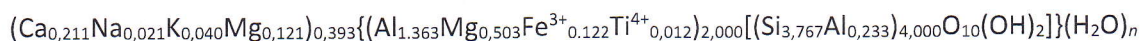
Vlastní výsledky doktorandky jsou uvedeny ve čtvrté kapitole a obsahují výsledky studia sorpce stroncia a cesia na bentonitu a výsledky difúzních experimentů s odvozením difúzních koeficientů pro různé elektrolyty a různé uspořádání pokusů. V diskusi doktorandka kriticky porovnává parametry získané různými metodami a způsobem vyhodnocení z vlastních experimentů i s hodnotami publikovanými v odborné literatuře. Kriticky se zamýšlí nad možnými příčinami zjištěných rozdílů. Za velmi důleži-

tou považuji podkapitolu, zabývající se přenosem sorpčních koeficientů ze vsádkových experimentů na podmínky kompaktovaného bentonitu.

Formální úpravě předložené doktorské práce byla věnována náležitá pozornost, téměř neobsahuje překlepy, dosažené výsledky jsou dobře dokumentovány na kvalitních grafech a v tabulkách. Autorka se dopustila některých typografických prohřešků, například někdy neodděluje jednotky od číselného údaje ( $\text{mmol}\cdot 100\text{g}^{-1}$ ), ve funkci logaritmu neodděluje funkci a její argument mezerou ( $\log K$ ) atd., jedná se však o drobnosti.

Poněkud na rozpacích jsem z faktického obsahu jednotlivých kapitol. Už v kapitole metodika jsou uvedeny některé výsledky řešení tématu, u metod stanovení jednotlivých parametrů je znovu uveden jejich teoretický popis a obecný význam, který už byl nebo měl být uveden v teoretické části. V rámci prezentace výsledků je u jednotlivých typů experimentů nejprve znovu opakován souhrn toho, co bylo děláno, pak souhrn dosažených výsledků a teprve pak následují výsledky vlastních měření a experimentů. Znovu je opakován popis metodiky a často je už v těchto podkapitolách uvedeno porovnání s literárními údaji a diskutovány možné příčiny rozdílů. Naopak, v diskusi jsou uváděny poměrně obsáhlé poznatky, které patří do teoretické části a souhrny dosažených výsledků, a dokonce prezentovány vlastní výsledky, které měly být uvedeny již v předchozí kapitole a které zbytečně diskusi „řeďí“. V kapitole *Závěry* jsou klíčové výsledky opět prokládány tím, co a jak bylo děláno. To vše čtenáři poněkud ztěžuje orientaci v hodnocení dosažených výsledků. Konkrétní příklady jsou uvedeny v příloze oponentního posudku

Na druhou stranu velmi oceňuji rozsah provedených experimentů a způsob s jakým se doktorandka vyrovnala s řešeným problémem. Zde považuji za nutné připomenout, že vlastnosti bentonitu jsou v hlavní míře určeny výrazně převažujícím minerálem montmorillonitem. Na rozdíl od většiny ostatních minerálů – přírodních chemických sloučenin – které jsou poměrně stabilní, mají relativně dobře definované chemické a fyzikální vlastnosti a poměrně jasné rozhraní pevná fáze-roztok, je montmorillonit velmi proměnlivý a jeho vlastnosti jsou velmi „elastické“ či „plastické“. Velmi idealizovaný chemický vzorec montmorillonitu je  $(\text{Na,Ca})_{0,33}(\text{Al,Mg})_2(\text{Si}_4\text{O}_{10})(\text{OH})_2\cdot n\text{H}_2\text{O}$ . Reálně však vypadá složení například takto



s tím, že se náboj v mezivrstvi pohybuje s širokých mezích 0,5–1,2 elektronů na polovinu elementární buňky. Navíc montmorillonit velmi citlivě reaguje na jakoukoliv změnu podmínek. Co a jak se bude uvolňovat závisí například na poměru pevná fáze:voda, na složení reagujícího média, i na drobnou změnu hodnoty pH přičemž sám montmorillonit hodnotu pH roztoku ovlivňuje a sám se rozpouští. Například při interakci s čistou vodou se přednostně uvolňuje vápník na úkor hořčíku, ale uvolňují se oba, sodík na úkor vápníku, opět se ale uvolňují oba a navíc se část montmorillonitu mění na illit  $(\text{K,H}_3\text{O})(\text{Al,Mg,Fe})_2(\text{Si,Al})_4\text{O}_{10}$ . Ze všech těchto faktorů vyplývá, že jsou chemické a fyzikální parametry bentonitů velmi závislé na podmínkách zkoušek a provedení experimentů, že je velmi nesnadné či nemožné získat parametry, které budou obecně platné a že je dokonce obtížné zajistit dobrou reprodukovatelnost.

Výsledky dosažené autorkou jsou z toho hlediska cenné, představují pokrok v metodice získávání důležitých údajů i ve vlastních údajích o českých bentonitech. Autorka pečlivě prověřovala různé vlivy provedení experimentů a podmínek a dobře se s nimi vyrovnala v kritické diskusi. Dosažené výsled-

ky jsou dobrým východiskem pro další výzkum směřující k použití bentonitu jako jedné z důležitých inženýrských bariér v hlubinném úložišti.

K doktorandce mám následující otázky:

Str. 44, posl. odst.: Jak se doktorandka dívá na přenositelnost údajů z výluhů, kde byly použity poměry m/V 0,02 a 0,1 g ml<sup>-1</sup> (4 a 20 g) do difúzních experimentů, ve kterých je poměr pevné a kapalné fáze řádově odlišný?

Str. 49, odst. 1: Je uvedeno, že „Pro kontrolu vlivu kyselého prostředí preparátu bylo před zahájením i po ukončení experimentů ve vzorcích měřeno pH.“ Co z naměřených hodnot vyplynulo?

Str. 101, odst. 1: autorka uvádí „Byla uvažována rovnováha s atmosférickým O<sub>2</sub> při sníženém parciálním tlaku 10-0,8 (= 15,8 % = 16,3 kPa).“ Jaký význam má přítomnost, respektive snížený parciální tlak kyslíku při měření sorpčních izoterem ve vsádkových experimentech?

Str. 106, odst. 1: autorka uvádí „Mohlo by jít o důsledek zvyšování množství sorpčních míst v důsledku rozpouštění nečistot (akcesorických minerálů) v bentonitu při nízké iontové síle roztoku.“ Jak si představuje zvyšování sorpčních míst tímto procesem, kde nová sorpční místa vzniknou?

Přestože mám k obsahovému uspořádání doktorské práce výše zmíněné připomínky, jsem přesvědčen, že jsou vlastní výsledky doktorandky velmi kvalitní, posouvají možnosti získávání transportních parametrů radionuklidů v bentonitech a ukazují nejistoty spojené s provedením experimentů. Autorka prokázala znalost řešené problematiky od teoretických základů až po praktické provedení. Oceňuji pečlivost, s jakou doktorandka prověřovala získaná data. Dílčí výsledky byly publikovány ve třech článcích v mezinárodních časopisech s impaktním faktorem 1,371–3,229, kde je doktorandka první autorkou, na mezinárodních konferencích a ve výzkumných zprávách. Zde jen malé povzdechnutí – škoda, že se autorka v doktorské práci více nedržela standardního uspořádání, které použila v publikacích. Práce by byla sevřenější, přehlednější, a ještě více by vynikla kvalita dosažených výsledků.

### **Závěr**

Podle mého názoru doktorandka prokázala, že je schopna samostatné vědecké práce a je schopna dosažené výsledky přesvědčivým způsobem zpracovat a prezentovat. Předkládaná disertační práce splňuje požadavky na tyto práce kladené zákonem. Práci doporučuji k obhajobě před stanovenou komisí a po úspěšném obhájení doporučuji udělení titulu Ph.D.

V Brně 20. 1. 2022

Doc. RNDr. Josef Zeman, CSc.

## Příloha

Vybrané připomínky:

Str. 174. odst. 4: Doktorandka uvádí, že „Hodnota pH při kterém má povrch nulový náboj se nazývá nulový bod náboje (NBN) ( $\xi_0$ ).“ Správné označení této veličiny je pH bodu nulového náboje  $pH_{pzc}$  (point of zero charge).

Str. 21 a dále: V kapitole 2.1.4 Mechanistické modely adsorpce je zahrnuto i modelování sorpce v programu PhreeqC. V této kapitole by měly být uvedeny obecné popisy, konkrétní způsob realizace v příslušném programu, jak jej použila autorka, by měl být spíše zahrnut do kapitoly 3. Materiály a metody.

Str. 40, kap. 2.2.6.1 a 2.2.6.2: Konkrétní modelování v programech GoldSim a PhreeqC by mělo být spíše uvedeno v kap. 3. Materiály a metody.

Str. 42, kap. 3.1.1: V názvu je inzerováno chemické a mineralogické složení použitého bentonitu, uveden je však pouze jediný údaj, a to zastoupení smektitu. Další údaje jsou nahrazeny pouze literárním odkazem.

Str. 43 a dále: U metodik stanovení jednotlivých parametrů je vždy na úvod uveden odstavec, který vysvětluje, co vlastně ten parametr představuje, přitom už byl podrobněji probrán v přehledu literární údajů. Například kationtová výměnná kapacita byla probrána už v samostatné podkapitole 2.1.2.1. To se týká prakticky všech sledovaných parametrů. Naopak, u některých částí použité metodiky by rozsáhlé odstavce měly být zařazeny do části, kterou doktorandka označila jako teoretickou. Zvláště nápadné je to u podkapitol pojednávajících o stronciu a cesiu. Použitá metodika by měla obsahovat pouze konkrétní charakterizaci a postupy, které byly při získávání výsledků použity.

Str. 60: Části kapitoly 3.5 Rozvoj metodiky modelování a vyhodnocování difúzních experimentů by měly patřit do teoretické části (např. kritérium WSOS/DF při optimalizaci parametrů modelů), části pak do výsledků, protože představují nové postupy způsobu modelování a vyhodnocování experimentů včetně konkrétních výstupů. Některé části této kapitoly zase obsahují části, které by bylo vhodnější uvést v kapitole 5. Diskuse (např. str. 75: „Autorka se domnívá, že výše naznačený důsledek dvojího charakteru transportu v kompaktovaném bentonitu má fyzikální opodstatnění...“).

Str. 96 a dále: V kapitole 4. Výsledky je vždy na začátku podkapitoly uvedeno, co bylo děláno, následně souhrn výsledků a teprve pak vlastní výsledky.

Str. 96, 108, 134, a 140: V prezentaci výsledků se opakovaně objevuje konstatování, že „Získané výsledky mohou sloužit jednak pro prohloubení pochopení mechanismů reaktivního transportu, jednak jako rozšíření charakterizace materiálů pro budoucí využití v rámci hodnocení bezpečnosti HÚ a jako vstupní data do transportních modelů.“ Taková a podobná konstatování nepatří do prezentace výsledků (mohly by být uvedeny u cílů práce nebo v závěrech).