

ZÁPADOČESKÁ UNIVERZITA V PLZNI

---

Fakulta elektrotechnická  
Katedra výkonové elektroniky a strojů

## **BAKALÁŘSKÁ PRÁCE**

Nečistoty jaderného paliva a strukturálních materiálů a jejich vliv na  
zadní část palivového cyklu

Autor práce: **Vojtěch Sem**  
Vedoucí práce: **Ing. Martin Lovecký Ph.D.**

---

2022

ZÁPADOČESKÁ UNIVERZITA V PLZNI

Fakulta elektrotechnická  
Akademický rok: 2022/2023

# ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(projektu, uměleckého díla, uměleckého výkonu)

Jméno a příjmení: **Vojtěch SEM**  
Osobní číslo: **E19B0027P**  
Studijní program: **B2644 Aplikovaná elektrotechnika**  
Téma práce: **Nečistoty jaderného paliva a strukturálních materiálů a jejich vliv na zadní část palivového cyklu**  
Zadávající katedra: **Katedra výkonové elektroniky a strojů**

## Zásady pro vypracování

Materiály v jaderném palivu a palivovém souboru mohou obsahovat různé prvky jako chemické nečistoty. Některé z těchto prvků mohou i při stopovém množství být neutrony aktivovány a mohou vytvořit radionuklidy s potenciálním vlivem na charakteristiky jaderného paliva v zadní části palivového cyklu. Cílem práce je určení vlivu nečistot z pohledu jejich neutronové aktivace.

1. Proveďte rešerši na téma nečistot v jaderném palivu a strukturálních materiálech v palivových souborech.
2. Popište metodiku výpočtů vyhořívání v Monte Carlo kódu Serpent.
3. Proveďte výpočet vyhořívání jaderného paliva VVER bez nečistot a s nečistotami.
4. Srovnajte vliv nečistot na aktivity vybraných radionuklidů v časech významných z pohledu skladování, transportu a ukládání vyhořelého jaderného paliva.

Rozsah bakalářské práce: **30 – 40**  
Rozsah grafických prací: **dle doporučení vedoucího**  
Forma zpracování bakalářské práce: **elektronická**

Seznam doporučené literatury:

1. J. Leppänen, M. Pusa, T. Viitanen, V. Valtavirta, T. Kaltiaisenaho: The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013, Annals of Nuclear Energy 82 (2015) 142-150.
2. S. Häkkinen: Impurities in LWR fuel and structural materials. VTT-R-00184-20, VTT, Finsko, 2019.

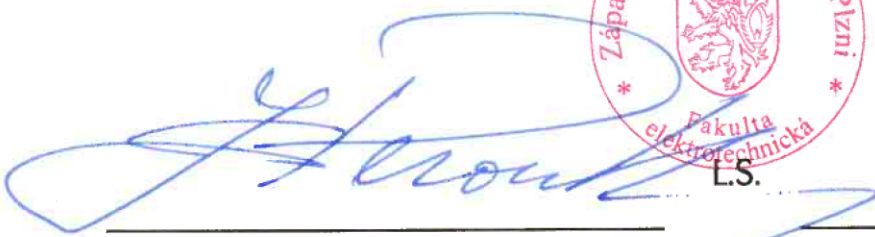
Vedoucí bakalářské práce: **Ing. Martin Lovecký, Ph.D.**  
Research and Innovation Centre for Electrical  
Engineering

Oponent bakalářské práce: **Ing. Jiří Závorka**  
Katedra elektroenergetiky

Datum zadání bakalářské práce: **7. října 2022**

Termín odevzdání bakalářské práce: **26. května 2023**



  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Ing. Zdeněk Peroutka, Ph.D.**  
děkan

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Ing. Václav Kús, CSc.**  
vedoucí katedry

V Plzni dne 7. října 2022

## **Abstrakt**

Předkládaná bakalářská práce se zabývá vlivem nečistot v jaderném palivu a jeho krytí na aktivitu radionuklidů během chlazení. Výpočet byl prováděn pomocí programu Serpent. V něm se nasimulovali dva palivové soubory pro reaktor VVER-1000. Jeden palivový soubor byl čistý, bez nečistot, druhý s nečistotami. Z výpočtů vyhoření obou souborů pak proběhlo jejich srovnání. Výsledkem je, že kromě značně zvýšené aktivity stávajících radionuklidů vznikli i radionuklidy nové.

## **Klíčová slova**

Serpent, VVER-1000, nečistoty, palivový soubor, jaderné palivo, Zircaloy-4

## **Abstract**

The presented bachelor thesis deals with the influence of impurities in nuclear fuel and its cladding on the activity of radionuclides during cooling. The calculation was performed using the Serpent program. Two fuel assemblies for the VVER-1000 reactor were simulated within the program. One fuel assembly was clean, without impurities, while the other contained impurities. A comparison of the burnup calculations for both assemblies was then carried out. As a result, besides a significantly increased activity of existing radionuclides, new radionuclides were also generated.

## **Key Words**

Serpent, VVER-1000, impurities, fuel assembly, nuclear fuel, Zircaloy-4

## **Poděkování**

Rád bych poděkoval vedoucí diplomové práce Ing. Martinu Loveckému, Ph.D za cenné rady, připomínky a ochotu při vedení práce.

## Obsah

1	Úvod .....	- 1 -
2	Nečistoty v jaderném palivu a strukturálních materiálech v palivových souborech .....	- 2 -
2.1	Nečistoty v jaderném palivu .....	- 4 -
2.2	Nečistoty v konstrukčních materiálech .....	- 7 -
3	Serpent .....	- 13 -
3.1	Geometrie .....	- 13 -
3.1.1	Definice povrchu .....	- 13 -
3.1.2	Definice buňky .....	- 14 -
3.1.3	Definice palivového proutku .....	- 14 -
3.1.4	Univerza a mřížky .....	- 15 -
3.2	Materiály .....	- 16 -
3.3	Metodika výpočtů vyhořívání .....	- 17 -
3.3.1	Ozařované materiály .....	- 17 -
3.3.2	Historie ozáření .....	- 18 -
3.3.3	Nastavení cesty knihoven .....	- 19 -
3.3.4	Normalizace .....	- 20 -
3.3.5	Řešení úbytkových rovnic .....	- 20 -
3.3.6	Cut-offy .....	- 21 -
3.3.7	Inventář nuklidů .....	- 22 -
3.3.8	Dodatečný výstupy .....	- 22 -
3.3.9	Produkce štěpného tepla v několika skupinách prekurzorů .....	- 23 -
3.3.10	Výstup v nezávislém režimu .....	- 23 -
3.4	Vytvoření palivových souborů bez a s nečistotami .....	- 24 -
3.5	Porovnání nečistot v palivových souborech .....	- 27 -
	Zhodnocení a závěr .....	- 36 -
	Literatura .....	- 37 -
	Přílohy .....	- 2 -

## Seznam symbolů a zkratk

Fe	železo
Th	thorium
Al	hliník
Pb	olovo
Ni	nikl
Cr	chrom
Cu	měď
Na	sodík
V	vanad
Zn	zinek
Mo	molybden
Sn	cín
Si	křemík
Ca	vápník
C	uhlík
N	dusík
Mg	hořčík
Mn	mangan
Ba	barium
W	wolfram
K	draslík
Co	kobalt
F	fluor
Ag	stříbro
Cd	kadmium
Bi	bismut
S	síra
Ti	titan
Cl	chlor
Ce	cer
Hf	hafnium



Nb	niobium
Ta	tantal
Sc	skandium
Ga	galium
Gd	gadolinium
In	Indium
Li	lithium
Sb	antimon
B	bor
Dy	dysposium
Er	erbium
Eu	europium
Ho	holmium
Lu	lutetium
Sm	samarium
Tb	terbium
Tm	thulium
Yb	ytterbium
Sr	stroncium
P	fosfor
Se	selen
La	lanthan
Br	brom
As	arsen
Ge	germanium
Au	zlato
H	vodík
Hg	rtuť
In	iridium
Os	osmium
Pt	platina
Re	rhenium
Ru	ruthenium
Te	tellur

Tl	thallium
Ar	argon
Be	beryllium
Pr	praseodym
Nd	neodym
U	uran
Pd	palladium
Rh	rhodium
Cs	cesium
I	jód
Rb	rubidium
O	kyslík
UO <sub>2</sub>	oxid uraničitý
VVER	vodo-vodní energetický reaktor

## 1 Úvod

Tato bakalářská práce se zabývá vlivem nečistot v jaderném palivu a strukturálních materiálech na zadní část palivového cyklu. Při výrobě jaderného paliva nebo součástí palivového souboru, například centrální trubky, se dostávají do materiálu různé nečistoty, které i při stopovém množství mohou vytvořit radionuklidy ovlivňující charakteristiku jaderného paliva nebo zvýšit aktivitu již existujících. Cílem této práce bylo pomocí Monte Carlo kódu Serpent vytvořit vstup pro dva různé palivové soubory, jeden, ideální, bez nečistot a druhý s nečistotami. Z výstupu těchto palivových souborů se pak porovnávali aktivity nuklidů po dobu chlazení 100 let.

Na začátku práce jsou popsány metody výroby jaderného paliva  $UO_2$  a slitiny Zircaloy-4, která se používá jako pokrytí. Dále jsou uvedeny výsledky rešerše, která se zabývala nečistotami v jaderném palivu a různých strukturálních materiálu, jejich množstvím a četností výskytu. Poté je zde popsán výpočetní kód Serpent, ve kterém v rámci této bakalářské práce byly prováděny výpočty 2-D modelu palivového souboru VVANTEGE-6, jednou pro teoretický čistý palivový soubor bez nečistot, druhý s nečistotami zjištěnými z rešerše. Další část práce se zabývá popisem metodiky výpočtů vyhořívání Serpentu, Závěrečná část práce se zabývá srovnáním výstupů kódu, uvedením nově vzniklých radionuklidů v palivu a pokrytí a srovnáním zvýšené aktivity radionuklidů z původního stavu.

## 2 Nečistoty v jaderném palivu a strukturálních materiálech v palivových souborech

Z důvodů různých technik těžby uranové rudy, jejího zpracování, přeměny fluoridu uranového ( $\text{UF}_6$ ) na v peletách používaný oxid uraničitý ( $\text{UO}_2$ ) či následného přidávání přísad pro lepší vlastnosti udávají různé zdroje různé hodnoty nečistot v jaderném palivu. Z obdobného důvodu jsou různé hodnoty nečistot v konstrukci palivové tyče. Tato část se zabývá popisem různých technologií výroby paliva a strukturálního materiálu a následným shrnutím, jaké a v jak velkém množství byly zaznamenány nečistoty v jaderném palivu a v materiálech palivových tyčí, zejména zirkonium, ale i nerezová ocel nebo inconel.[1]

Těžba uranové rudy se realizuje buď pomocí otevřenou těžbou nebo metodou in-situ. Při otevřené těžbě se ruda těží z klasického otevřeného dolu. Princip metody in-situ je rozpouštění oxidu uranu do cirkulující vody vhnáné do podzemí.

Ruda se následně mele za účelem extrakce uranu. Mletí zahrnuje drcení a vyluhování v kyselině sírové. Poté je oxid zahříván a sušen, čímž vznikne koncentrát  $\text{U}_3\text{O}_8$ , kterému se také říká žlutý koláč (v originále „yellowcake“). Tento koncentrát je pak poslán na obohacení.

Aby se palivo obohatilo, musí se nejdříve přeměnit na plynné skupenství. Za tímto účelem se  $\text{U}_3\text{O}_8$  přemění na hexafluorid  $\text{UF}_6$ , který při teplotě vyšší než  $57^\circ\text{C}$  sublimuje. Následné obohacení se pak provádí v odstředivkách.

Výroba paliva se dělí na 3 části. Vyrobení  $\text{UO}_2$  z  $\text{UF}_6$ , Výroba  $\text{UO}_2$  pelet a nakonec výroba kovové konstrukce palivového souboru a nakládání pelet do proutků, jejich utěsnění a vložení do souboru.

Existují 2 metody výroby  $\text{UO}_2$ , suchá a mokrá. Mokré metody jsou 2, procedura s uranylkarbonátem amonným (AUC) a procedura s diuranátem amonným (ADU). U obou metod se do kapalné vody vstříkuje  $\text{UF}_6$ , čímž vzniká  $\text{UO}_2\text{F}_2$ . Dle metody se pak do směsi přidává buď amoniak (ADU) nebo uhličitan amonný (AUC). Následují filtrace, sušení a ohřevy.

Při suché metodě se  $\text{UF}_6$  zahřeje na páru a smíchá se s párou  $\text{UO}_2\text{F}_2$ . Vodík v páře odstraňuje fluorid a redukuje uran na  $\text{UO}_2$ . [1]

Kvůli špatné odolnosti zirkonia vůči korozi je nutné tuto odolnost zvýšit legováním. Zirkonium se získává ze zirkoniového písku  $Zr-Hf SiO_4$ . Poměr zirkonia a hafnia je 50:1. Hafnium coby prvek s velkým tepelným průřezem je velmi nežádoucí nečistota a je snaha ho během výrobního procesu co nejvíce odstranit. K výrobě kovového zirkonia se používají 3 metody: Krollů, Van Arkelův a elektrolytický.

Při Krollově metodě se extrakce zirkonia z písku provádí jeho přeměno na  $ZrCl_4$  procesem karbochlorace. Po separaci hafnia se kovové zirkonium získá redukcí plynného  $ZrCl_4$  pomocí kapalného hořčíku při teplotě  $850^\circ C$ . Van Arkelova metoda je dražší ale dosahuje výsledků čistšího zirkonia. Tato metoda je založena na reakci zirkonia s jódem, který vytváří  $ZrI_4$ . Zirkonium se pak odseparuje od jódu při vysokých teplotách. V elektrolytickém procesu nejdříve dojde k frakční destilaci za účelem snížení hafnia. Zirkonium je poté odděleno pomocí operace zahrnující reakce s  $K_2SiF_6$  a vzniku  $K_2ZrF_6$ . Tuto metodu lze brát jako střední cestu, nečistoty nejsou tak vysoké jako u Krollově metodě ale pořád vyšší než u Van Arkelově, obdobně ale v opačném smyslu je to i s cenou.[1]

## 2.1 Nečistoty v jaderném palivu

Tabulka 1 uvádí nečistoty v jaderném palivu s koncentrací přesahující 100 ppm.

Tabulka 1 Opakovaně se vyskytující nečistoty v jaderném palivu s vysokou koncentrací

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]	zdroje
Fe	18-600	[1][2][3][4]
Th	10-500	[1][4]
Al	0,8-400	[1][2][3]
Pb	1-400	[1][2][3][4]
Ni	1-400	[1][2][3][4]
Cr	1,3-2715	[1][2][3][4]
Cu	1-415	[1][2][3][4]
Na	20-400	[1][2]
V	3-400	[1][4]
Zn	9-400	[1][2]
Mo	0,3-400	[1][3][4]
Sn	1-400	[1][4]
Si	120-250	[1][3]
Ca	2-1450	[1][2][3][4]
C	32-200	[1][3]
N	25-200	[1][3]
Mg	2,3-200	[1][2][3]
Mn	0,2-200	[1][2][3]
Ba	20-100	[1][4]
W	2-3171	[1][4]
K	20-139	[1][2]

Pomineme-li nečistoty přesahující 1000 ppm, které všechny vycházejí ze zdroje [4], nejvýznamnější nečistoty v jaderném palivu jsou železo, následované thoriem, křemíkem, hliníkem a uhlíkem. Koncentrace chromu přesahující 1000 ppm pravděpodobně souvisí s úmyslným dopováním jaderného paliva chromem pro zlepšení jeho vlastností [5]. Lze si povšimnout, že u většiny uvedených nečistot je poměrně velký rozptyl jejich naměřených hodnot.

Tabulka 2 uvádí nečistoty, u kterých byla naměřena maximální koncentrace v řádech desítek ppm.

Tabulka 2 Opakovaně se vyskytující nečistoty v jaderném palivu s maximální koncentrací desítek ppm

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]	zdroje
Co	1-75	[1][2][3][4]
F	25-50	[1]
Ag	0,1-25	[1]
Cd	0,06-25	[1][2][3]
Bi	0,3-20	[1][3][4]
S	20	[1]
Ti	1-20	[1]
Cl	2-15	[1][3]
Ce	3,45-10	[1][4]
Hf	4,6-10	[1][4]
Nb	2,6-10	[1][4]
Ta	9-10	[1][4]
Sc	1,14-20	[1][4]

Nečistoty v malých hodnotách, jednotek až desetin ppm, jsou uvedeny v Tabulce 3.

Tabulka 3 Opakovaně se vyskytující nečistoty v jaderném palivu s nízkou koncentrací

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]	zdroje
Ga	0,11-3	[1][4]
Gd	0,2-2,5	[1]
In	0,8-2	[1][3]
Li	1	[1]
Sb	1-7,26	[1][4]
B	0,2-1	[1][3]
Dy	0,3-0,82	[1][4]
Er	0,3-0,9	[1][4]
Eu	0,3-0,68	[1][4]
Ho	0,1-0,3	[1][4]
Lu	0,13-0,3	[1][4]
Sm	0,3-1,54	[1][4]
Tb	0,07-0,3	[1][4]
Tm	0,03-0,3	[1][4]
Yb	0,3-2,14	[1][4]
Sr	2,53-7,72	[4]

Tabulka 4 uvádí prvky, které uvádí jen jediný zdroj. U zdroje [1] je to myšleno ve smyslu jen jedné reference daného prvku. U zdroje [4] jsou uvedeny dvě hodnoty, jedna pro neobohacené palivo a druhá pro palivo obohacené.

Tabulka 4 Ojediněle zjištěné nečistoty v jaderném palivu

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]	zdroje
P	60	[1]
Sc	20	[1]
Se	20	[1]
La	10	[1]
Br	5	[1]
As	3	[1]
Ge	3	[1]
Au	1	[1]
H	1	[1]
Hg	1	[1]
Ir	1	[1]
Os	1	[1]
Pt	1	[1]
Re	1	[1]
Ru	1	[1]
Te	1	[1]
Tl	1	[1]
Ar	0,1	[1]
Be	0,1	[1]
Pr	0,46-0,90	[4]
Nd	0,91-2,53	[4]

Lze konstatovat, že mezi pravidelně vyskytující se nečistoty patří železo, nikl, chrom, měď, vápník a kobalt. Tyto prvky se v různé míře koncentrace vyskytly ve všech uvedených zdrojích.



## 2.2 Nečistoty v konstrukčních materiálech

V tabulce 5 jsou uvedeny opakovaně zjištěné nečistoty ve slitině Zircaloy-2.

Tabulka 5 Opakovaně se vyskytující nečistoty v Zircaloy-2

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]	zdroje
C	120-270	[1]
Hf	78-200	[1]
Si	20-200	[1]
W	20-100	[1]
N	65-80	[1]
Al	24-75	[1]
Cu	20-50	[1]
Mg	10-50	[1]
Mn	20-50	[1]
Mo	5-50	[1]
Ti	20-50	[1]
V	20-50	[1]
H	13-25	[1]
Cr	20	[1]
Co	2-20	[1]
U	0,2-3,5	[1]
B	0,33-0,5	[1]
Cd	0,25-0,5	[1]

Ve všech uvedených zdrojích se jako největší nečistota shodně uvádí uhlík a následně hafnium. Mezi další nejvýznamnější nečistoty, které se pravidelně vyskytují, patří křemík, wolfram a dusík. Zdroj [3] zaznamenal vysoké koncentrace nečistot jako tantalu, olova a niobu, které se však v ostatních zdrojích nevyskytly. Tyto a další ojediněle se vyskytující nečistoty uvádí Tabulka 6.

Tabulka 6 Ojediněle zjištěné nečistoty v Zircaloy-2

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]	zdroje
Ta	200	[1]
Pb	130	[1]
Ni	100	[1]
S	35	[1]
Ca	30	[1]
Na	20	[1]

V tabulce 7 jsou uvedeny opakovaně zjištěné nečistoty ve slitině Zircaloy-4.

Tabulka 7 Opakovaně se vyskytující nečistoty v Zircaloy-4

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]	zdroje
C	120-4200	[1][6][7]
Si	35-320	[1][7]
Hf	60-2500	[1][6][7]
Ta	200	[1]
Pb	130	[1][7]
Nb	100	[1][7]
W	20-100	[1][7]
N	39-100	[1][6][7]
Ni	20-700	[1][7]
Al	15-75	[1][7]
P	30-60	[1][7]
Cu	20-50	[1][7]
Mg	20-50	[1][7]
Mn	25-50	[1][7]
Mo	50	[1][7]
Ti	20-50	[1][7]
V	20-50	[1]
S	20-35	[1]
Ca	2-30	[1][7]
H	10-25	[1][6][7]
Co	1,5-20	[1][7]
Th	10	[1]
U	0,2-10	[1][7]
F	5-6	[1]
Na	2-20	[1][7]
Cd	0,25-0,7	[1][7]
B	0,33-0,5	[1][7]

Ve zdrojích [6] a [7] jsou železo a kyslík uváděny jako velké nečistoty s koncentrací přes 1000 ppm. Tyto prvky však nejsou ani zmíněny v žádné referenci ve zdroji [1]. Vedle značného množství opakujících se nečistot uvádí zdroj [1] i velké množství ojedinělých výskytů nečistot. Všechny ojedinělé nečistoty ve zdroji [1] jsou pouze v 1 referenci a většinu těchto prvků uvádí tabulka 8. Existuje však více zjištěných prvků, avšak vzhledem k již velkému počtu ojedinělých prvků nebyly prvky s koncentrací výskytu v řádu 1 desetin ppm v tabulce uvedeny. Jedná se například o argon, zlato, rtuť nebo thallium.

Tabulka 8 Ojediněle zjištěné nečistoty v Zircaloy-4

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]	zdroje
Be	100	[1]
Ag	10	[1]
Pd	10	[1]
Sb	10	[1]
Sc	10	[1]
Ga	5	[1]
Rh	5	[1]
Ru	5	[1]
As	1	[1]
Bi	1	[1]
Br	1	[1]
Ce	1	[1]
Ge	1	[1]
I	1	[1]
In	1	[1]
Ir	1	[1]
K	1	[1]
Os	1	[1]
Pt	1	[1]
Rb	1	[1]
Re	1	[1]
Se	1	[1]
Sr	1	[1]
Te	1	[1]
Y	1	[1]
Zn	1	[1]
Gd	0,6	[1]

Kromě těchto ojedinělých nečistot uvádí zdroj [7] další 2 ojedinělé nečistoty a to chlor s koncentrací 20 ppm a zirkonium s hodnotou přesahující 1000 ppm.

V tabulce 9 jsou vypsány nejčastěji se vyskytující nečistoty ve slitině Zr2.5. V Tabulce 10 jsou pak uvedeny nečistoty o nízké hodnotě ppm, přičemž ne všechny prvky zdroje [1] jsou zahrnuty, nejmenší nečistoty byly zanedbány. Jedná se například o prvky lithium, barium nebo germanium.

Tabulka 9 Opakovaně se vyskytující nečistoty v Zr2.5Nb

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]	zdroje
C	30-270	[1][8]
P	<10-240	[1][8]
Cr	<50-200	[1][8]
Ta	<100-200	[1][8]
Pb	<25-130	[1][8]
Ag	11-120	[1]
Si	12-120	[1][8]
Hf	<25-100	[1][8]
W	<25-100	[1][8]
N	25,7-80	[1][8]
Ni	<35-80	[1][8]
Al	26-75	[1][8]
Cu	<25-50	[1][8]
Mn	<25-50	[1][8]
Mo	<10-50	[1][8]
Ti	0,006-50	[1][8]
V	<25-50	[1][8]
Ca	0,028-25	[1]
H	<3-25	[1][8]
Co	<10-20	[1][8]
Mg	20	[1]
Na	0,1-18	[1]
S	4,6-16	[1]
Cl	0,5-15	[1]
Sb	1,5-13	[1]
In	0,38-11	[1]
Zn	0,061-<50	[1][8]

Tabulka 10 Ojediněle zjištěné nečistoty v Zircaloy-2.5Nb

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]	zdroje
U	<1-3,5	[1][8]
Ga	0,34-1	[1]
Sc	0,74.1	[1]
Th	0,11-<3,5	[1][8]
Bi	0,089-0,9	[1]
Sr	0,06-0,6	[1]
B	<0,25-0,5	[1][8]
Cd	<0,25-0,6	[1][8]
Au	0,01-0,4	[1]
Y	0,15-0,4	[1]
Pt	0,041-0,3	[1]
Rb	0,17-0,3	[1]
Te	0,036-0,3	[1]
K	0,032-0,2	[1]
Se	0,038-0,2	[1]
As	0,038-1	[1]
Br	0,021-0,1	[1]
Cs	0,035-0,1	[1]

V zdroji [8] jsou uváděny jediné ojediněle se vyskytující nečistoty v slitině Zircaloy-2 a to cín, železo, gadolinium a samarium. Koncentrace železa dosahuje vysoké hodnoty 1100 ppm, zatímco zbytek nečistot se pohybuje v rozmezí nižších desítek až jednotek ppm. Důležité taky zmínit, že zdroj [8] u valné většiny nečistot není uvedena konkrétní hodnota, ale pouze označení, pod jakou úrovní ppm nečistota je (<25 ppm apod.).

Tabulky 11,12,13 uvádějí nečistoty v Inconel 718, Inconel X-750 a nerezové oceli SS 304. Všechny tyto informace pocházejí pouze ze zdroje [1].

Tabulka 11 Opakovaně se vyskytující nečistoty v Inconel 718

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]
Co	4694-10000
Cu	2730-7500
Si	1997-7500
Mn	1997-5000
C	400-1000
S	70-300
P	140-150
B	50-60

Tabulka 12 Opakovaně se vyskytující nečistoty v Inconel X-750

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]
Co	300-10000
Mn	6984-10000
Cu	499-5000
Si	2993-5000
C	200-800
S	50-100

Tabulka 13 Opakovaně se vyskytující nečistoty v SS 304

Prvek	Rozmezí zjištěných nečistot [ppm]
N	1300
Co	800
P	230-450
S	150-300

## 3 Serpent

Simulace vyhořívání byla provedena v programu Serpent. Serpent je víceúčelový třírozměrný kód pracující na metodě Monte Carlo. Serpent byl původně vyvinut jako kód pro fyziku reaktorů, jeho rozsah byl v průběhu let značně rozšířen. Kód je napsaný v ANSI-C jazyku a běží na operačním systému Linux. Operace se provádějí přes terminál. [9]

### 3.1 Geometrie

Pro popis struktur používá Serpent geometrický model univerz. Geometrie je rozdělena do několika rozdílných oblastí, které jsou konstruovány nezávisle a jsou vnořeny jedna do druhé. [10]

#### 3.1.1 Definice povrchu

Syntaxe pro definování povrchu je:

```
surf <id> <type> <param1> <param2> ...
```

kde <id> je číslo sloužící jako identifikátor povrchu

<type> je typ povrchu

<param1> <param2> jsou parametry povrchu

V Serpentu lze vybrat mezi 20 typy povrchů. Při našem výpočtu byl použit povrch typu hexxc, jedná se o šestihran typu x, který má parametry:

```
surf <id> <hexxc> <x $\theta$ > <y $\theta$ > <r> <r $\theta$ >
```

Konkrétní příklad použitý při výpočtu:

```
surf s1 hexxc 0.0 0.0 11.8
```

Povrchy se používají k definování geometrie buněk. Za tímto účelem má každý povrch zavedený kladnou a zápornou stranu. Pokud je bod uvnitř povrchu, nachází se na negativní straně povrchu. [10]

### 3.1.2 Definice buňky

V Serpentu je buňka definována jako dvourozměrná nebo třírozměrná oblast, která je definována kladnými a zápornými povrchy. Kód zvládne pracovat pouze s průsečíky hranic ploch. To znamená, že neutron je uvnitř buňky tehdy, když je na stejné straně každé hranice povrch.

Syntaxe pro definování buňky je:

```
cell <name> <u0> <mat> <surf1> <surf2>...
```

kde	<name>	je jméno buňky
	<u0>	je číslo univerza buňky
	<mat>	je materiál buňky
	<surf1> <surf2>	jsou hranice povrchů buňky [10]

Příklad buňky použité ve výpočtu, kdy Buňka c1 patří do základního universa 0, Je vyplněna mřížkou lat1 a pokrývá vše uvnitř povrchu s1:

```
cell c1 0 fill lat1 -s1
```

### 3.1.3 Definice palivového proutku

Palivový proutky nejsou skutečný geometrický objekt, ale spíš makro objekty, které se používají k definování univerza proutku.

Syntaxe pro definování proutku je:

```
pin <id>  
<mat1> <r1>  
<mat2> <r2>  
...  
<mat n>
```

kde	<id>	je název proutku
	<mat1> <mat2>	jsou materiály
	<r1> <r2>	sou hranice povrchů buňky [10]



Příklad použitého pinu při výpočtech palivové tyče:

```
pin FF
fuelNoGad 0.3922
void       0.4001
Zircaloy4 0.4572
water
```

### 3.1.4 Univerza a mřížky

Každé univerzum je definováno nezávisle a musí pokrývat celý prostor. Regiony prostoru nepatřícího do geometrie musí být definovaný pomocí vnějších buněk.

Mřížky jsou speciální univerza, vyplněné pravidelnou strukturou jiných univerz. Serpent má 8 typů mřížky.

Syntaxe pro definování mřížky je:

```
lat <u0> <type> <x0> <y0> <nx> <ny> <p>
```

kde	<u0>	je číslo univerza mřížky
	<type>	je typ mřížky (1,2 nebo 3)
	<x0>	počáteční souřadnice osy x
	<y0>	počáteční souřadnice osy y
	<nx>	je počet prvků mřížky ve směru x
	<ny>	je počet prvků mřížky ve směru y
	<p>	je rozteč mřížky [10]

Příklad použité mřížky při výpočtech:

```
lat lat1 3 0.0 0.0 25 25 1.275
```

### 3.2 Materiály

Každý materiál se skládá ze seznamu nuklidů, které jsou propojeny s knihovnou průřezů.

Obecně používaný zápis nuklidu je:

$\langle Z \rangle \langle A \rangle . \langle id \rangle$

kde	$\langle Z \rangle$	je protoné číslo daného nuklidu
	$\langle A \rangle$	je hmotnostní číslo nuklidu (3-místné)
	$\langle id \rangle$	je id knihovny

Syntaxe pro definování materiálu je:

*Mat*  $\langle name \rangle$   $\langle dens \rangle$   $\langle options \rangle$   
 $\langle iso1 \rangle$   $\langle frac1 \rangle$   
 $\langle iso2 \rangle$   $\langle frac2 \rangle$

Kde	$\langle name \rangle$	je název materiálu
	$\langle dens \rangle$	je hustota materiálu
	$\langle options \rangle$	jsou možnosti (závisí na konkrétním případě)
	$\langle iso1 \rangle$ $\langle iso2 \rangle$	jsou zápisy nuklidů
	$\langle frac1 \rangle$ $\langle frac2 \rangle$	jsou odpovídající zlomky daného nuklidu

Hustoty a zlomky mohou být zapsány v atomové nebo hmotnostní hodnoty. Pozitivní zápisy (se znaménkem +) znamenají zápis atomové hodnoty, v jednotkách  $10^{24}/\text{cm}^3$ . Negativní zápis (se znaménkem -) odpovídá zápisu hustoty v jednotkách  $\text{g}/\text{cm}^3$ . [10]

Příklad materiálu FuelNoGad použitého ve výpočtu, který se skládá z nuklidů  $\text{U}^{235}$ ,  $\text{U}^{238}$  a  $\text{O}^{16}$ .

```
mat fuelNoGad -10.412 tmp 900.0 rgb 255 255 150 burn 1
92235.02c -0.0264
92238.02c -0.8551
8016.02c -0.1185
```

Tmp 900 nastavuje teplotu nuklidů na 900 K. rgb 255 255 150 je nastavení barevného vyobrazení daného materiálu. Burn je identifikátor vyhořivaného materiálu, jak je vysvětleno dále. Číslo 1 udává počet prstencových oblastí.

### 3.3 Metodika výpočtů vyhořívání

Serpent používá interní výpočetní rutinu pro řešení Batemanových rovnic, což jsou diferenciální rovnice popisující změnu počtu jader izotopů v čase. Tyto změny jsou způsobeny neutronovými reakcemi a radioaktivním rozpadem.

K výpočtu vyhořívání mohou být přidány dodatečné vstupy, jako je identifikace ozařovaných materiálů nebo historie ozáření. Dále existují parametry pro určení cest k souborům a možnostem používané výpočetními rutinami.

Výpočet vyhořívání je oproti simulaci v ustáleném stavu velmi citlivý na malé změny v geometrii, materiálech a výpočetních parametrech. Teplotní rozdíl pouhých 30K může vést k 1% rozdílnosti koncentrace prvků. [10]

#### 3.3.1 Ozařované materiály

Ozařované materiály se identifikují pomocí přídatného vstupu „burn“ v kartě materiálu.

Například: *mat <name> <dens> burn <nr>*

*<iso 1> <frac 1>*

*<iso 2> <frac 2>*

kde	<name>	je název materiálu
	<dens>	je hustota (hmotnostní nebo atomová)
	<nr>	je počet prstenců v ozařovaných palivových tyčích
	<iso 1> <iso 2>	jsou názvy složek nuklidů
	<frac 1> <frac 2>	jsou příslušné podíly (hmotnostní nebo atomové) [10]

Každá typ palivového proutku obsahující ozařovaný materiál je zpracováván samostatně a rozdělen do určitého počtu prstencových oblastí s rovnoměrným objemem.

Kód automaticky přejmenovává ozařované materiály tyčí:

<mat>p<np>r<nr>

kde <mat> je původní název materiálu

<np> je číslo tyče

<nr> je číslo kroužku, začínající od nejvnitřnější oblasti (=1) [10]

### 3.3.2 Historie ozáření

Historie ozáření se skládá z jednoho či více intervalů vyhořívání, definované kartou „dep“:

dep <styp>

<step 1>

<step 2>

kde <styp> je typ kroku

<step 1> <step 2> jsou kroky vyhořívání

Typy kroků jsou v Tabulce 14

Tabulka 14 Typy kroků historie ozáření

<styp>	typ kroku	Hodnoty kroků
bustep	krok vyhořívání	interval vyhořívání jsou zadány v MWd/kgU
butot	krok vyhořívání	Kumulativní vyhořívání je zadáno v MWd/kgU
daystep	krok vyhořívání	interval času jsou zadány ve dnech
daytot	krok vyhořívání	kumulativní čas je zadán ve dnech
decstep	krok chlazení	interval času jsou zadány ve dnech
dectot	krok chlazení	kumulativní čas je zadán ve dnech

Typy decstep a dectot, který jsou kroky rozpadu, vynechávají transportní cyklus a zabývají se pouze radioaktivním rozpadem, což značně urychluje výpočet. [10]

Příklad ozařovacích kroků použitý ve výpočtech:

body vyhoření pro výpočet vyhořívání (v MWd/kgU):

dep butot 0.1 0.5 1 4 6 8 10 12 14 16 18 20 24 28 32 36 40  
45 50

Rozpad po vyjmutí paliva z reaktoru:

dep decstep 365 365 365 365 365 365 365 365 365 365 365 1825 1825 1825 1825  
1825 1825 3650 3650 3650 3650 3650 3650

Výsledný čas rozpadu je 100 let.

### 3.3.3 Nastavení cesty knihoven

Provedení výpočtů vyhořívání vyžaduje několik údajů, data o radioaktivním rozpadu, knihovnu průřezů s kontinuální energií a výstupní produkci neutronů a spontánního štěpení. Tyto soubory jsou čteny ze souborů ENDF ve formátu . Cesta k nim musí být nastavena.

Pro nastavení cesty k datům o radioaktivním rozpadu se používá příkaz

```
set declib „<file>“,
```

dále pro nastavení cesty k výstupu štěpení vyvolaný neutrony se používá příkaz

```
set nfylib „<file>“
```

a pro cestu k výstupu spontánního štěpení se používá

```
set sfylib „<file>“
```

kde <file> je cesta k souboru knihovny dat.

Knihovna výtěžků spontánního štěpení je volitelná. Pokud není nastavena, kód využívá výtěžky pro neutronové štěpení. [10]

### 3.3.4 Normalizace

Při některých problémech s výpočtem vyhořívání může geometrie obsahovat štěpitelné materiály, které nejsou ozařovány, což může mít vliv na zdroj normalizace.

Serpent nabízí 3 možnosti nastavení, které se nastavují pomocí příkazu:

```
set bunorm <mode>
```

Kde <mode> je normalizační mód.

Mód 1 je výchozí nastavení, který normalizuje reakční rychlost nebo výkon ve všech materiálech. Mód 2 zahrnuje pouze hořlavé materiály a režim 3 pouze materiály nehořlavé.

Kód automaticky vypočítává celkovou štěpitelnou hmotnost v systému, která je potřebná k normalizaci reakčních rychlostí. Pokud výpočet selže, hodnota může být nastavena ručně pomocí:

```
set fmass <m>
```

kde <m> je celková štěpitelná hmotnost systému v gramech. [10]

### 3.3.5 Řešení úbytkových rovnic

Serpent má na výběr mezi 3 možnostmi a 2 metodami řešení Batemanových rovnic, které popisují změny izotopického složení způsobené reakcemi vyvolané indukovanými neutrony a radioaktivním rozpadem.

Výpočetní mód je nastaven pomocí:

```
set bumode <mode>
```

kde <mode> je metoda pro řešení úbytkových rovnic.

Metodou 1 je analýza transmutační trajektorie (Transmutation Trajectory Analysis – TTA) založená na analytickém řešení linearizovaných transmutačních řetězců. Metoda 2, která je výchozí, je pokročilé řešení matice exponenciálních funkcí založené na Chebyshevově racionální aproximační metodě. Metoda 3 je metoda variace analýzy transmutační trajektorie, při které jsou cyklické transmutační řetězce řešeny indukci malých změn v koeficientech místo řešení rozšířených rovnic TTA.

Aktivace výpočtu prediktor-kolektor se provádí pomocí příkazu

```
set pcc <corr>
```

kde <corr> příkaz pro spuštění korektorového kroku (0 = ne, 1 = ano). Ve výchozím nastavení je tato metoda aktivovaná, vede k přesnějšímu odhadu změn izotopického složení během každého kroku spalování. Avšak má tu nevýhodu, že se opakuje transportní cyklus, což vede ke zvýšení výpočetního času.

Výpočet transmutačních průřezů

Serpent nabízí volbu mezi 2 možnostmi pro výpočet izotopních jednoskupinových transmutačních průřezů, nastavují se pomocí:

```
set xsalc <mode>
```

kde <mode> určuje použitou metodu. [10]

V metodě 2, což je metoda výchozí, kód vypočítává parametry pomocí vysokého rozlišení spektra toku zaznamenaného během transportního výpočtu. Tento postup má za následek snížení výpočetního času ve srovnání s přímým výpočtem průřezů během transportního cyklu, což je postup metody 1. Nevýhodou metody 2 je, že je pouze přibližná a informace o statistické přesnosti jsou ztraceny. Pro možnost porovnávání obou metod existuje ještě nastavení <mode> = 3. [10]

### 3.3.6 Cut-offy

Z důvodu snížení náročnosti výpočtu, používá kód Serpent několik cut-offů, konkrétně cut-offy pro výtěžek štěpného produktu, rozsah hmotnostních řetězců aktinidů, stability, TTA řetězce, zlomek průřezu a prahové energie.

Cut-off pro výtěžek štěpného produktu udává, které štěpné produkty jsou zahrnuty do výpočtu. Výběr je založen na kumulativní výtěžnosti každé hmotnostní řady štěpných produktů, nastavuje se pomocí:

```
set fpcut <lim>
```

kde <lim> je limit pro cut-off výtěžnosti štěpných produktů.

Ve výchozím nastavení je rozsah hmotových řetězců aktinidů zahrnutých do výpočtu od  $A_{\min} - 1$  do  $A_{\max} + 7$ , kde  $A_{\min}$  a  $A_{\max}$  jsou nejmenší a největší hmotnostní čísla aktinidů v počáteční složení. Tento rozsah lze nastavit ručně pomocí příkazu:

```
set axs <Amin> <Amax>
```

Cut-off stability se nastavuje pomocí:

```
set stabcut <lim>
```

kde <lim> je limit pro stabilitu.

Pro nastavení cut-offu TTA řetězce se pak používá příkaz ttacut a nastavuje se limit pro zkrácení TTA řetězce, pro zlomek průřezů se pak používá příkaz xsfcut a nastavuje se limit pro ukončení řetězce zlomků průřezů. Pro nastavení cut-offu prahové energie se používá příkaz xsecut a nastavuje se energetická hranice pro ukončení. [10]

### 3.3.7 Inventář nuklidů

Standartní výstup v režimu nezávislého výpočtu se skládá ze složení materiálu, transmutačních průřezů, aktivity a hodnoty rozpadového tepla. Nuklidy a prvky, které se ve výstupu objeví, se nastavují pomocí příkazu:

```
set inventory <id1> <id2> ...
```

kde <idn> jsou identifikátory.

Seznam obsahuje numerické hodnoty, které identifikují nuklidy nebo prvky. Jsou přijímána taky jména a symboly izotopů a prvků, například „Pu-239“, „Cs“, nebo „plutonium“. Prvkové hodnoty jsou vypočteny součtem izotopů. V Tabulce 15 jsou uvedeny další možnosti, které lze použít pro součet několika prvků. [10]

Tabulka 15 Možnosti součtu několika prvků

ID	Název	Popis
201	act	Aktinidy (Z > 89)
202	fp	Štěpné produkty
204	dp	Rozpadové produkty od thoria v přirozené řadě aktinoidů
208	ng	Vzácné plyny (v oblasti štěpných produktů, bez helia a radonu)

### 3.3.8 Dodatečný výstup

Serpent umožňuje složení ozařovaných materiálů do samostatného výstupu po každém kroku, nastavuje se pomocí

```
set printm <mode>
```

kde <mode> je nastavení pro tisk složení materiálu (0 = ne, 1 = ano). Pro každý krok Serpent vyprodukuje samostatný výstupní soubor pojmenovaný „<input>.bumat<n>“. <input> označuje název vstupního souboru a <n> je číslo kroku vyhořívání. [10]



### 3.3.9 Produkce štěpného tepla v několika skupinách prekurzorů

Produkce štěpného tepla může být rozdělena do několika skupin prekurzorů v závislosti na konstantě rozpadu nuklidů. Syntaxe pro použití této volby je:

```
set dhprec [ <l0> <l1> ...]
```

kde <ln> jsou hranice skupin v rostoucím pořadí. Pokud není zadáno, použijí se výchozí hodnoty. Výstup je vytisknut v hlavním výstupním souboru. [10]

### 3.3.10 Výstup v nezávislém režimu

Výstup výpočtu spalování v nezávislém režimu výpočtu je zapsán v Matlab souborovém formátu v souboru "<input>\_dep.m", kde <input> je název vstupního souboru. Proměnné jsou shrnuty v Tabulce. Počet kroků spalování je N a počet nuklidů v inventáři je I. Parametry pro jednotlivé materiály jsou vypsány pro každý vyhořelý materiál. Pokud je použita metoda prediktor-korektor, složení materiálů je uvedeno na začátku každého kroku. Transmutační průřezy nejsou ekvivalentní s opravenými hodnotami použitými pro řešení rovnic vyčerpávání. [10]

Tabulka 16 Proměnné výstupu

Proměnná	Velikost	Obsah
BU	(1, N)	Kumulativní vyhořívání v MWd/kgU
DAYS	(1, N)	Kumulativní čas vyhoření v dnech
i<ZAI>	1	Tabulkový index pro nuklid <ZAI>
iTOT	1	Tabulkový index pro celkové hodnoty
iLOST	1	Tabulkový index pro ztracená data
ZAI	I + 2,1	ZAI nuklidů
NAMES	I + 2,8	Názvy nuklidů
MAT_<mname>_VOLUME	1, N	Objem materiálu <mname>
MAT_<mname>_FLUX	1, N	Objemově integrovaný tok v materiálu <mname>
MAT_<mname>_ADENS	I + 2, N	Atomové hustoty v materiálu <mname>
MAT_<mname>_MDENS	I + 2, N	Hmotnostní hustoty v materiálu <mname>
MAT_<mname>_A	I + 2, N	Aktivity v materiálu <mname>
MAT_<mname>_H	I + 2, N	Rozpadové teplo materiálu <mname>
MAT_<mname>_FISSXS	I + 2, N	(n, f) průřezy v materiálu <mname>
MAT_<mname>_CAPTXS	I + 2, N	(n, γ) průřezy materiálu <mname>
MAT_<mname>_N2NXS	I + 2, N	(n,2n) průřezy v materiálu <mname>
TOT_VOLUME	1	Celkový objem vyhořelých materiálů
TOT_ADENS	I + 2, N	Celkově průměrované atomové hustoty
TOT_MASS	I + 2, N	Celková hmotnost
TOT_A	I + 2, N	Celková aktivita
TOT_H	I + 2, N	Celkové rozpadové teplo

### 3.4 Vytvoření palivových souborů bez a s nečistotami

Byly vytvořeny 2 rozdílné vstupy. Jako první byl vytvořen vstup pro palivový soubor bez nečistot. Nadefinoval se jednotlivý použitá materiál, vytvořili se jednotlivé piny, mřížka, povrch a buňky. Palivový soubor byl nadefinován podle paliva VVANTEGE-6 [11], což je palivový soubor pro reaktory VVER-1000, který se používá i v Jaderné elektrárně Temelín. Použitý materiál je Zircaloy-4.

Dále bylo potřeba nadefinovat parametry chodu a nastavení pro výpočet vyhořívání. Hustota výkonu byla nastavena na 0,04kW/g. Dále se nastavily jednotlivé body vyhořívání až do hodnoty 50 MWd/kgU a jednotlivé kroky rozpadu až do 100 let.

Po výpočtu vyhořívání tohoto souboru byly přidány do materiálů pro palivo UO<sub>2</sub> a pokrytí Zircaloy-4. Nečistoty byly přidány na základě dříve udělané rešerše a byly přidány nečistoty v řádech maximálně desetin ppm, které nebyly ojedinělé. Z obou výstupů se pak porovnávali aktivity radionuklidů v palivu a v pokrytí pro kroky rozpadu. Jelikož oba výstupy obsahují aktivity pro více než 1000 radionuklidů, v rámci zjednodušení se srovnávali jen nuklidy s relativním poločasem rozpadu, to znamená ve stovkách dnů až let. Tabulka 17 udává zvolený počet nečistot v jaderném palivu a v pokrytí. Tento počet nečistot byl pak rozdělen podle procentuálního přírodního výskytu jednotlivých nuklidů.

Nečistoty jaderného paliva a strukturálních materiálů a jejich vliv na zadní část palivového cyklu  
Vojtěch Sem 2023

Tabulka 17 Zvolené množství nečistot v jaderném palivu a pokrytí v hodnotám ppm

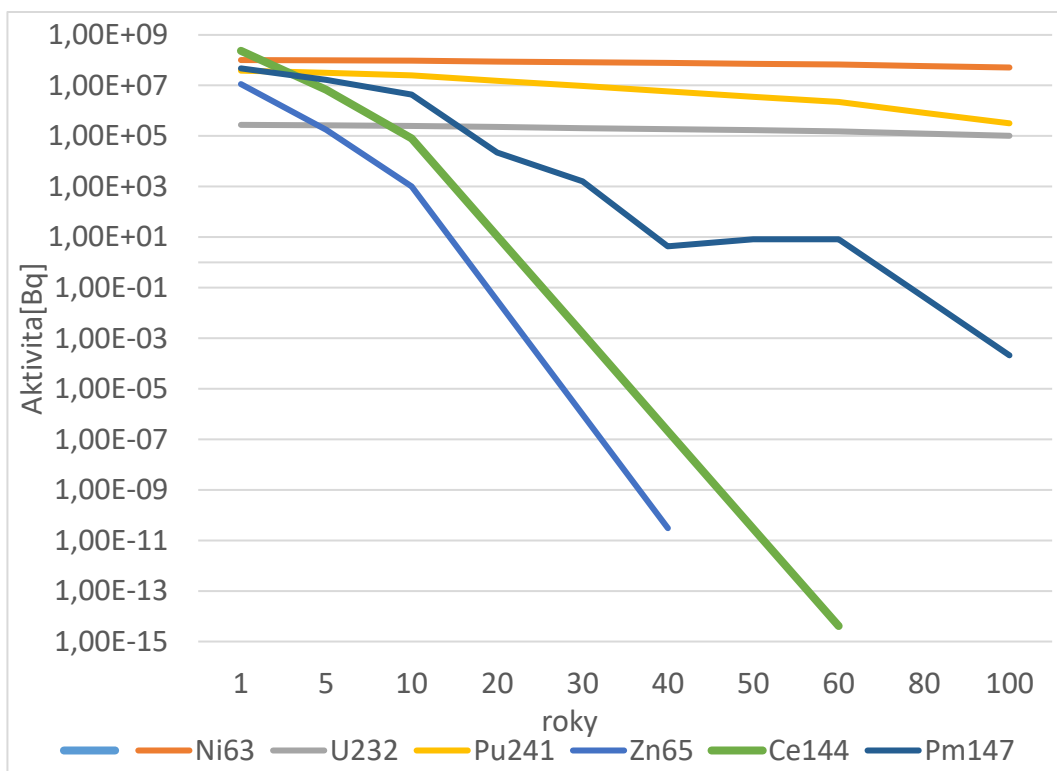
palivo UO <sub>2</sub>		Zircaloy-4	
Prvek	ppm	Prvek	ppm
Ag	1	Al	75
Al	100	C	300
Bi	0,4	Ca	30
C	200	Co	20
Ca	100	Cu	50
Cd	0,4	F	5
Ce	10	H	25
Cl	5	Hf	100
Co	20	Mg	20
Cr	50	Mn	50
Cu	50	Mo	50
Dy	0,3	N	80
Eu	0,3	Na	20
F	30	Nb	100
Fe	600	Ni	70
Gd	0,3	P	60
Hf	10	Pb	130
Ho	0,3	S	35
In	1	Si	120
K	20	Ta	200
Mg	60	Th	10
Mn	20	Ti	50
Mo	8	U	3,5
N	100	V	50
Na	400	W	100
Nb	10		
Ni	60		
Pb	10		
S	20		
Sb	1		
Sc	20		
Si	120		
Sm	0,3		
Sn	1		
Ta	10		
Tb	0,3		
Th	500		
Ti	20		
V	400		
W	2		
Zn	40		

### 3.5 Porovnání nečistot v palivových souborech

Z výstupů vyšlo, že v krocích rozpadu se objevili nové radionuklidy pro oba materiály. V palivu to bylo 29 radionuklidů a v pokrytí skoro 3x více, 79 radionuklidů. V následujících tabulkách 18 a 19 jsou tyto radionuklidy uvedeny s jejich aktivitou. Aktivita Bq je vztažena na jeden palivový soubor (PS). Jelikož pro jednoduchost byl v Serpentu vytvořen 2-D model palivového souboru, jedná se o Bq/PS/cm.

Z tabulky 18 lze vyzorovat, že mezi neaktivnější radionuklidy i z dlouhodobého hlediska patří hlavně radionuklidy niklu Ni59 a Ni63. Dále to jsou Cl36, Ar39 a Ca41. Některé další prvky mají vysokou aktivitu v prvním roce, ale v dlouhodobém hledisku aktivita značně klesá. Jedná se o prvky Na22, V49, Zn65, Cd109, Tl204, Nb95m, Lu173 a Lu174 a Ta179.

Aktivita radionuklidu Fe55 je téměř polovina celkové aktivity radionuklidů v prvním roce. Po 50. roce aktivita tohoto radionuklidu značně klesá, zhruba v časovém období 80 let je jeho aktivita téměř nulová. Z dlouhodobějšího hlediska je neaktivnějším prvkem Ni63, který po 50 letech obstarává okolo 80% celkové aktivity nových radionuklidů. Oba radionuklidy jsou z prvků přidaných v nečistotách. Aktivita nejdůležitějších radionuklidů v čase je zobrazena v Grafu 1.

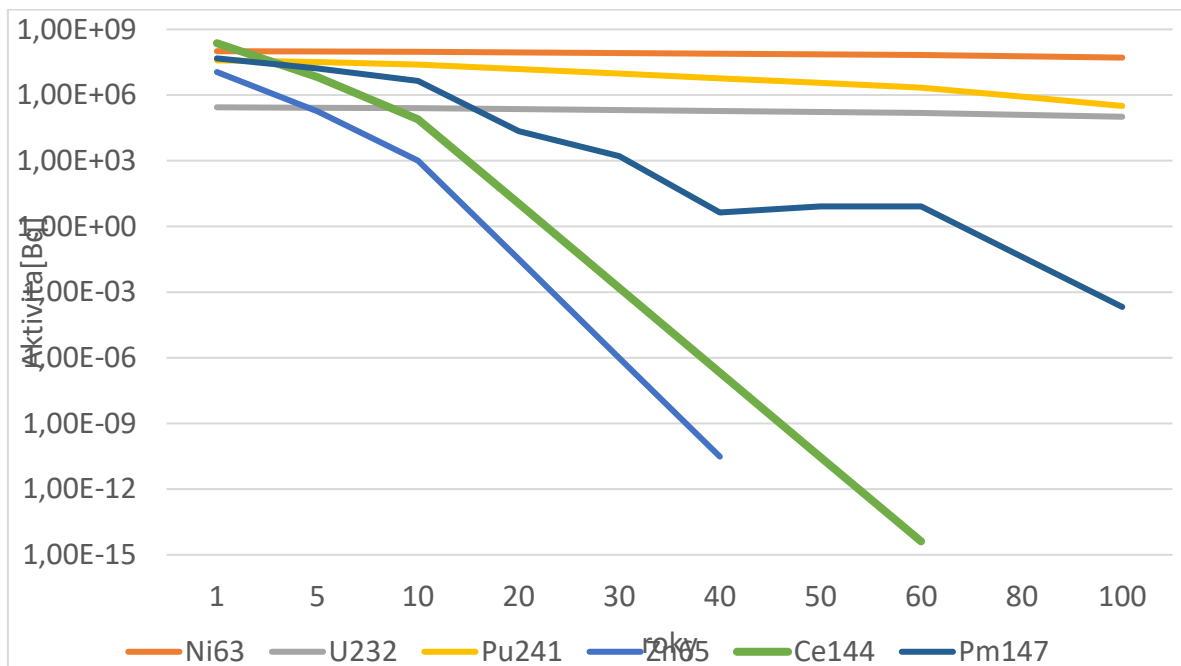


Graf 1 aktivita nových radionuklidů v UO2 v čase

Tabulka 18 nové radionuklidy v palivu UO<sub>2</sub> a jejich aktivita v čase

Radionuklid	Aktivita [Bq]				
	1.rok	20.rok	50.rok	80.rok	100.rok
Ar39	5,90E+07	5,61E+07	5,20E+07	4,81E+07	4,57E+07
Ar42	9,08E+00	6,09E+00	3,23E+00	1,72E+00	1,13E+00
Bi207	1,30E+02	8,55E+01	4,43E+01	2,29E+01	1,48E+01
Bi208	9,63E+00	9,63E+00	9,63E+00	9,63E+00	9,63E+00
Ca41	2,36E+05	2,37E+05	2,36E+05	2,36E+05	2,36E+05
Cd109	4,06E+08	1,22E+04	8,72E-04	6,26E-11	1,08E-15
Cl36	6,95E+05	6,95E+05	6,95E+05	6,95E+05	6,95E+05
Fe55	2,02E+10	1,67E+08	8,59E+04	4,41E+01	2,83E-01
Gd148	5,29E-15	4,43E-15	3,36E-15	2,54E-15	2,11E-15
Hf172	1,13E+01	9,94E-03	1,48E-07	2,21E-12	1,34E-15
Hf182	6,34E+01	6,34E+01	6,34E+01	6,34E+01	6,34E+01
K40	1,12E+02	1,12E+02	1,12E+02	1,12E+02	1,12E+02
Lu173	7,11E+03	4,78E-01	1,24E-07	3,20E-14	1,30E-18
Lu174	1,17E+04	2,20E+02	4,18E-01	7,75E-04	1,18E-05
Mn53	1,19E-01	1,18E-01	1,19E-01	1,19E-01	1,19E-01
Na22	1,37E+05	8,75E+02	2,98E-01	1,01E-04	4,96E-07
Nb95m	1,81E+10	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Ni59	2,18E+06	2,18E+06	2,18E+06	2,18E+06	2,18E+06
Ni63	3,64E+08	3,19E+08	2,60E+08	2,12E+08	1,85E+08
Os194	5,19E-19	5,79E-20	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Pb202	8,12E-03	8,12E-03	8,12E-03	8,12E-03	8,12E-03
Pb205	4,68E+00	4,68E+00	4,68E+00	4,68E+00	4,68E+00
Po208	3,01E-02	3,21E-04	2,47E-07	1,90E-10	1,59E-12
Po209	1,14E+00	1,00E+00	8,18E-01	6,68E-01	5,80E-01
Si32	4,88E+02	4,48E+02	3,91E+02	3,41E+02	3,12E+02
Ta179	2,70E+05	1,95E+02	2,15E-03	2,36E-08	1,17E-11
Tl204	4,59E+03	1,42E+01	5,83E-01	2,40E-03	6,16E-05
V49	6,68E+05	3,15E-01	3,42E-05	0,00E+00	0,00E+00
Zn65	4,40E+09	1,22E+01	3,73E-13	0,00E+00	0,00E+00
celkově	4,35E+10	5,45E+08	3,15E+08	2,63E+08	2,34E+08

Jak lze vidět v tabulce 19, i když je nových radionuklidů v pokrytí téměř 3x více, konkrétně 61, aktivita velké většiny z nich je zanedbatelná a jejich celková aktivita nedosahuje takových hodnot jako aktivita v palivu, ať už v krátkodobém období kolem 1 roku, či dlouhodobém v řádu desítek let. Stejně jako u paliva je zde hlavně z dlouhodobého hlediska neaktivnější Ni63, jehož aktivita v měřítku 50 a více let je až 90% celkové aktivity. Další důležité radionuklidy jsou radionuklidy polonia, hlavně Pu238 a Pu241 a dále U232 a Th228. V krátkodobém hledisku je však neaktivnějším prvkem radionuklid ceria Ce144, jehož aktivita je více než polovina celkové aktivity. Aktivita nejdůležitějších radionuklidů v čase je zobrazena v Grafu 2.



Graf 2 aktivita nových radionuklidů v Zircaloy-4 v čase

Tabulka 19 nové radionuklidy v pokrytí ze slitiny Zircaloy-4 a jejich aktivita v čase

Radionuklid	Aktivita [Bq]				
	1.rok	20.rok	50.rok	80.rok	100.rok
Ac227	5,51E+01	2,96E+02	4,75E+02	5,43E+02	5,63E+02
Al26	8,54E-01	8,54E-01	8,54E-01	8,54E-01	8,54E-01
Am241	9,62E+04	8,45E+05	1,18E+06	1,22E+06	1,19E+06
Am243	1,64E+04	1,64E+04	1,64E+04	1,63E+04	1,63E+04
Bi207	6,16E-02	4,06E-02	2,10E-02	1,00E-02	7,01E-03
Bi208	4,48E-03	4,48E-03	4,48E-03	4,48E-03	4,48E-03
Ce144	2,34E+08	1,10E+01	2,96E-11	0,00E+00	0,00E+00
Cf249	1,40E-01	2,10E-01	2,00E-01	1,90E-01	1,80E-01
Cf250	1,99E-10	1,97E-09	2,78E-09	2,94E-09	2,94E-09
Cf251	4,91E-08	4,84E-08	4,84E-08	4,62E-08	4,55E-08
Cm243	1,41E+04	8,95E+03	4,38E+03	2,15E+03	1,33E+03
Cm244	4,07E+06	1,97E+06	9,15E+05	1,98E+05	9,22E+04
Cm245	7,18E+02	7,17E+02	7,15E+02	7,13E+02	7,12E+02
Cm246	2,25E+02	2,24E+02	2,23E+02	2,22E+02	2,21E+02
Cm247	1,25E-03	1,25E-03	1,25E-03	1,25E-03	1,25E-03
Cm248	5,42E-03	5,42E-03	5,41E-03	5,41E-03	5,41E-03
Cm250	3,74E-08	3,73E-08	3,72E-08	3,71E-08	3,71E-08
Co57	2,63E+06	5,47E-02	4,05E-14	0,00E+00	0,00E+00
Co60m	3,56E-03	3,56E-03	3,56E-03	3,56E-03	3,56E-03
Dy154	1,51E-19	1,51E-19	1,51E-19	1,51E-19	1,51E-19
Eu150	4,55E-03	3,19E-03	1,81E-03	1,03E-03	7,10E-04
Eu152	4,94E+02	1,87E+02	4,03E+01	8,67E+00	3,11E+00
Eu154	2,50E+06	5,40E+05	4,82E+04	4,31E+03	8,60E+02
Eu155	1,50E+06	9,42E+04	1,19E+03	1,50E+01	8,10E-01
Gd150	1,70E-12	1,70E-12	1,70E-12	1,70E-12	1,70E-12
Gd153	4,13E+00	8,56E-09	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Ge68	1,04E-07	2,05E-15	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Hf172	2,25E+01	1,98E-02	2,96E-07	4,42E-12	2,68E-15
Hf182	1,64E+02	1,64E+02	1,64E+02	1,64E+02	1,64E+02
Ho163	1,63E-04	1,62E-04	1,62E-04	1,61E-04	1,61E-04
La137	7,48E-03	7,48E-03	7,48E-03	7,47E-03	7,47E-03
Lu173	1,40E+04	9,43E-01	2,44E-07	6,30E-14	2,56E-18
Lu174	2,57E+04	4,82E+02	9,00E-01	1,70E-03	2,59E-05
Na22	1,33E+03	8,47E+00	2,88E-03	9,83E-07	4,80E-09
Ni63	1,01E+08	8,87E+07	7,22E+07	5,88E+07	5,13E+07
Np235	1,60E-01	9,01E-07	4,32E-15	0,00E+00	0,00E+00
Np236	4,81E-04	4,81E-04	4,81E-04	4,81E-04	4,81E-04
Np237	9,99E+00	1,33E+01	2,35E+01	3,53E+01	4,30E+01
Os194	1,35E-18	1,51E-19	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Pa231	5,87E+02	5,87E+02	5,86E+02	5,86E+02	5,86E+02
Pb202	2,20E-02	2,20E-02	2,20E-02	2,20E-02	2,20E-02
Pb205	1,40E+01	1,40E+01	1,40E+01	1,40E+01	1,40E+01



Nečistoty jaderného paliva a strukturálních materiálů a jejich vliv na zadní část palivového cyklu  
Vojtěch Sem 2023

Pb210	2,68E+00	1,49E+00	6,30E-01	3,50E-01	3,00E-01
Pd107	4,84E+01	4,84E+01	4,84E+01	4,84E+01	4,84E+01
Pm143	5,10E-05	6,76E-13	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Pm144	2,84E-04	5,04E-10	4,19E-19	0,00E+00	0,00E+00
Pm145	1,19E+00	5,74E-01	1,77E-01	5,48E-02	2,50E-02
Pm146	2,14E+00	1,98E-01	4,60E-03	1,08E-04	8,83E-06
Pm147	4,73E+07	3,14E+05	1,14E+02	4,13E-02	2,10E-04
Pu236	5,14E-02	5,79E-04	6,53E-05	6,49E-05	6,49E-05
Pu238	3,75E+05	3,44E+05	2,72E+05	2,15E+05	1,83E+05
Pu239	6,68E+04	6,68E+04	6,68E+04	6,67E+04	6,67E+04
Pu240	9,57E+04	1,01E+05	1,05E+05	1,06E+05	1,06E+05
Pu241	3,85E+07	1,53E+07	3,58E+06	8,37E+05	3,18E+05
Pu242	1,18E+03	1,18E+03	1,18E+03	1,18E+03	1,18E+03
Pu244	8,25E-04	8,25E-04	8,25E-04	8,25E-04	8,25E-04
Ra226	4,18E-03	3,90E-02	1,10E-01	2,10E-01	2,90E-01
Ra228	1,00E+01	1,20E+01	1,20E+01	1,20E+01	1,20E+01
Sm145	1,82E-01	1,32E-07	2,67E-17	0,00E+00	0,00E+00
Sm146	1,68E-05	1,68E-05	1,68E-05	1,68E-05	1,68E-05
Sm151	1,04E+05	9,02E+04	7,16E+04	5,68E+04	4,87E+04
Ta179	1,65E+05	1,19E+02	1,31E-03	1,44E-08	7,12E-12
Tb157	3,46E-02	2,88E-02	2,14E-02	1,60E-02	1,31E-02
Tb158	6,06E-03	5,63E-03	5,02E-03	4,47E-03	4,14E-03
Th228	1,31E+05	2,35E+05	1,74E+05	1,28E+05	1,05E+05
Th229	1,68E+01	1,16E+02	2,72E+02	4,27E+02	5,31E+02
Th230	3,62E+00	4,89E+00	6,90E+00	8,90E+00	1,02E+01
Th232	1,23E+01	1,23E+01	1,23E+01	1,23E+01	1,23E+01
Tl204	1,38E+04	4,26E+02	1,75E+00	7,22E-03	1,85E-04
Tm171	1,75E+01	1,80E-02	3,69E-07	7,35E-12	5,40E-15
U232	2,76E+05	2,28E+05	1,69E+05	1,25E+05	1,02E+05
U233	5,53E+04	5,53E+04	5,53E+04	5,53E+04	5,53E+04
U234	7,27E+03	7,29E+03	7,32E+03	7,34E+03	7,35E+03
U235	6,60E-01	6,60E-01	6,60E-01	6,60E-01	6,60E-01
U235m	6,68E+04	6,68E+04	6,68E+04	6,67E+04	6,67E+04
U236	5,73E+00	5,78E+00	5,87E+00	5,97E+00	6,03E+00
U238	1,23E+01	1,23E+01	1,23E+01	1,23E+01	1,23E+01
Zn65	1,13E+07	3,12E-02	9,56E-16	0,00E+00	0,00E+00
celkově	4,44E+08	1,09E+08	7,90E+07	6,19E+07	5,37E+07

Kromě vzniku nových radionuklidů došlo v obou materiálech i k výraznému zvýšení některých radionuklidů, které vznikli i bez přidání nečistot. V jaderném palivu mělo přidání nečistot vliv na 36 radionuklidů, jenž jsou uvedeny v následující tabulce s aktivitou jak pro čisté palivo, tak pro palivo s nečistotami. Je důležité zmínit, že na větší část radionuklidů, konkrétně 61, měli nečistoty prakticky nulový nebo minimální vliv a nejsou v tabulce uvedeny. Týká se i radionuklidů Cs134 a Cs137, jenž mají zdaleka největší aktivitu ze všech radionuklidů. Pro porovnání se zbylými radionuklidy, Cs134 má v prvním roce aktivitu  $1,2214E+13$  Bq, Cs137 má i po 80 letech aktivitu  $1,2E+12$  Bq. Jako nejdůležitější nárůst lze označit nárůst aktivity u radionuklidu C14, kdy vyrostl až na hodnotu  $1,73E+08$  Bq. Další významná navýšení aktivity proběhla u radionuklidů Ac227, H3, Mo93, Tha228 a radionuklidy uranu U232, U233 a U234. Řádově největší zvýšení aktivity proběhli u radionuklidů s velmi nízkou aktivitou. I po tomto zvýšení je však jejich aktivita ve většině případů zanedbatelná. Jedná se například o Dy154, Fe60, Hf172, Nb91m, Ra228, Th229, Th232.

Nečistoty jaderného paliva a strukturálních materiálů a jejich vliv na zadní část palivového cyklu  
Vojtěch Sem 2023

Tabulka 20 zvýšení aktivity radionuklidů v palivu UO<sub>2</sub> a jejich aktivita v čase

Radionuklid	Aktivita [Bq]									
	1.rok		20.rok		50.rok		80.rok		100.rok	
	čistý	nečistoty	čistý	nečistoty	čistý	nečistoty	čistý	nečistoty	čistý	nečistoty
Ac227	4,89E+00	1,62E+04	5,47E+01	8,79E+04	2,02E+02	1,41E+05	3,87E+02	1,62E+05	5,20E+02	1,68E+05
Be10	1,32E+02	4,71E+02	1,32E+02	4,71E+02	1,32E+02	4,71E+02	1,32E+02	4,71E+02	1,32E+02	4,71E+02
Bk249	1,86E+04	4,18E+06	1,27E+00	1,25E+00	6,37E-11	6,25E-11	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
C14	8,70E+04	1,73E+08	8,68E+04	1,72E+08	8,65E+04	1,72E+08	8,61E+04	1,71E+08	8,59E+04	1,71E+08
Dy154	4,29E-14	2,22E-08	4,29E-14	2,22E-08	4,29E-14	2,22E-08	4,29E-14	2,22E-08	4,29E-14	2,22E-08
Eu150	1,23E+03	1,80E+03	8,60E+02	1,26E+03	4,90E+02	7,18E+02	2,79E+02	4,08E+02	1,91E+02	2,80E+02
Fe60	8,84E-12	1,33E-02	8,84E-12	1,33E-02	8,84E-12	1,33E-02	8,84E-12	1,33E-02	8,84E-12	1,33E-02
Gd150	5,66E-07	2,43E-06	5,66E-07	2,43E-06	5,66E-07	2,43E-06	5,66E-07	2,43E-06	5,66E-07	2,43E-06
Gd153	1,11E+06	1,59E+06	2,30E-03	3,29E-03	4,46E-17	6,38E-17	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Ge68	1,12E-04	1,41E-04	2,22E-12	2,77E-12	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
H3	9,73E+05	1,52E+08	3,34E+05	5,23E+07	6,19E+04	9,68E+06	1,15E+04	1,79E+06	3,72E+03	5,82E+05
Hf172	3,16E-03	1,13E+01	2,77E-06	9,94E-03	4,14E-11	1,48E-07	1,52E-17	2,21E-12	3,75E-19	1,34E-15
Ho163	2,20E+01	2,29E+01	2,19E+01	2,29E+01	2,18E+01	2,28E+01	2,17E+01	2,27E+01	2,16E+01	2,26E+01
La137	1,23E+03	4,91E+03	8,96E+02	4,91E+03	8,96E+02	4,90E+03	8,96E+02	4,90E+03	8,95E+02	4,90E+02
Mo93	5,94E+01	1,40E+05	5,92E+01	1,40E+05	5,89E+01	1,39E+05	5,86E+01	1,38E+05	5,84E+01	1,38E+05
Nb91	2,44E+00	2,67E+03	2,39E+00	2,62E+03	2,32E+00	2,54E+03	2,22E+00	2,46E+03	2,20E+00	2,41E+03
Nb91m	6,35E-08	3,83E-01	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Nb92	3,72E-03	2,72E+00	3,72E-03	2,72E+00	3,72E-03	2,72E+00	3,72E-03	2,72E+00	3,72E-03	2,72E+00
Nb94	2,51E+04	1,70E+06	2,51E+04	1,70E+06	2,51E+04	1,70E+06	2,51E+04	1,70E+06	2,51E+04	1,70E+06
Pa231	4,22E+01	1,74E+05	1,74E+02	1,74E+05	3,83E+02	1,74E+05	5,91E+02	1,74E+05	7,31E+02	1,74E+05
Pb210	2,69E-01	8,25E+02	1,01E+00	4,59E+02	2,39E+01	2,17E+02	1,24E+02	2,28E+02	2,66E+02	3,53E+02
Pm143	3,30E+00	1,49E+03	4,37E-08	1,98E-05	0,00E+00	7,19E-18	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Pm144	2,89E+01	1,18E+02	5,13E-05	2,09E-04	4,26E-14	1,74E-13	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Pm145	2,60E+05	4,81E+05	1,25E+05	2,62E+05	3,86E+04	8,09E+04	1,19E+04	2,50E+04	5,46E+03	1,14E+04
Ra226	1,23E-02	1,17E+00	5,92E+00	1,67E+01	7,87E+01	1,10E+02	2,96E+02	3,54E+02	5,53E+02	6,31E+02
Ra228	3,40E-02	2,74E+03	6,17E-02	3,27E+03	8,17E-02	3,33E+03	1,08E-01	3,33E+03	1,15E-01	3,33E+03
Tb157	7,64E+03	2,44E+05	6,35E+03	2,03E+05	4,74E+03	1,51E+05	3,53E+03	1,13E+05	2,91E+03	9,29E+04
Tb158	1,54E+03	1,60E+03	1,43E+03	1,49E+03	1,27E+03	1,32E+03	1,14E+03	1,18E+03	1,05E+03	1,09E+03
Th228	1,24E+04	3,66E+07	2,39E+04	6,53E+07	1,78E+04	4,84E+07	1,32E+04	3,58E+07	1,08E+04	2,92E+07
Th229	8,70E-01	4,63E+03	3,71E+00	3,20E+04	1,55E+01	7,50E+04	3,70E+01	1,18E+05	5,73E+01	1,47E+05
Th230	2,51E+01	1,03E+03	1,91E+03	3,25E+03	1,04E+04	1,22E+04	2,43E+04	2,66E+04	3,60E+04	3,87E+04
Th232	5,76E-02	3,33E+03	7,00E-02	3,33E+03	9,76E-02	3,33E+03	1,11E-01	3,33E+03	1,24E-01	3,33E+03
Tm171	8,82E+06	9,28E+06	9,30E+03	9,79E+03	1,85E-01	1,95E-01	3,70E-06	3,89E-06	2,72E-09	2,86E-09
U232	2,50E+04	7,69E+07	2,33E+04	6,36E+07	1,73E+04	4,70E+07	1,29E+04	3,48E+07	1,05E+04	2,84E+07
U233	6,23E+02	1,53E+07	2,57E+03	1,53E+07	5,85E+03	1,53E+07	9,48E+03	1,53E+07	1,21E+04	1,53E+07
U234	2,07E+06	3,94E+06	1,91E+07	2,10E+07	4,14E+07	4,32E+07	5,90E+07	6,07E+07	6,86E+07	7,03E+07
celkově	1,34E+07	4,75E+08	1,98E+07	3,92E+08	4,17E+07	3,38E+08	5,92E+07	3,22E+08	6,88E+07	3,17E+08

Nečistoty jaderného paliva a strukturálních materiálů a jejich vliv na zadní část palivového cyklu  
Vojtěch Sem 2023

Tabulka 21 zvýšení aktivity radionuklidů v pokrytí ze slitiny Zircaloy-4 a jejich aktivita v čase

Radionuklid	Aktivita [Bq]									
	1.rok		20.rok		50.rok		80.rok		100.rok	
	čistý	nečistoty	čistý	nečistoty	čistý	nečistoty	čistý	nečistoty	čistý	nečistoty
Ar39	3,03E-10	2,02E+04	2,88E-10	1,92E+04	2,67E-10	1,78E+04	2,47E-10	1,65E+04	2,34E-10	1,57E+04
Ar42	1,61E-07	4,61E-01	1,08E-07	3,09E-01	5,72E-08	1,64E-01	3,04E-08	8,70E-02	2,00E-08	5,70E-02
Ba133	1,19E-12	1,94E+01	3,41E-13	5,55E+00	4,73E-14	7,70E-01	6,55E-15	1,10E-01	1,75E-15	2,86E-02
C14	1,96E+02	3,35E+07	1,96E+02	3,34E+07	1,95E+02	3,33E+07	1,94E+02	3,32E+07	1,94E+02	3,31E+07
Ca41	5,78E-15	1,59E+04	5,78E-15	1,59E+04	5,78E-15	1,59E+04	5,78E-15	1,59E+04	5,77E-15	1,59E+04
Cl36	7,37E-20	2,64E+01	7,37E-20	2,64E+01	7,37E-20	2,64E+01	7,37E-20	2,64E+01	7,37E-20	2,64E+01
Co60	3,83E+07	4,20E+10	3,16E+06	3,46E+09	6,13E+04	6,71E+07	1,19E+03	1,30E+06	8,58E+01	9,40E+04
Cs134	3,34E-05	6,35E+07	5,70E-08	1,08E+05	2,43E-12	4,62E+00	1,04E-16	1,97E-04	1,27E-19	2,41E-07
Cs135	2,35E-12	1,42E+02	2,35E-12	1,42E+02	2,35E-12	1,42E+02	2,35E-12	1,42E+02	2,35E-12	1,42E+02
Cs137	2,41E-12	5,09E+07	1,56E-12	3,28E+07	7,81E-13	1,65E+07	3,91E-13	8,25E+06	2,47E-13	5,20E+06
Fe60	1,54E-13	3,56E-03	1,54E-13	3,56E-03	1,54E-13	3,56E-03	1,54E-13	3,56E-03	1,54E-13	3,56E-03
H3	4,13E+05	2,63E+07	1,42E+05	9,03E+06	2,63E+04	1,67E+06	4,87E+03	3,09E+05	1,58E+03	1,01E+05
I129	4,76E-04	2,02E+01	4,76E-04	2,02E+01	4,76E-04	2,02E+01	4,76E-04	2,02E+01	4,76E-04	2,02E+01
In115	6,32E-09	1,11E-08	6,32E-09	1,11E-08	6,32E-09	1,11E-08	6,32E-09	1,11E-08	6,32E-09	1,11E-08
K40	1,34E-19	3,74E+00	1,34E-19	3,74E+00	1,34E-19	3,74E+00	1,34E-19	3,74E+00	1,34E-19	3,74E+00
Kr81	9,67E-13	5,74E-04	9,67E-13	5,74E-04	9,67E-13	5,74E-04	9,67E-13	5,74E-04	9,67E-13	5,74E-04
Kr85	1,66E+01	7,69E+06	4,88E+00	2,26E+06	7,00E-01	3,28E+05	1,00E-01	4,75E+04	2,89E-02	1,31E+04
Mo93	1,52E+00	2,01E+05	1,52E+00	2,00E+05	1,50E+00	1,99E+05	1,50E+00	1,98E+05	1,50E+00	1,98E+05
Nb91	2,66E-06	3,60E+03	2,61E-06	3,53E+03	2,53E-06	3,43E+03	2,46E-06	3,32E+03	2,41E-06	3,26E+03
Nb91m	7,30E-14	5,10E-01	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Nb92	1,69E-07	4,84E+00	1,69E-07	4,84E+00	1,69E-07	4,84E+00	1,69E-07	4,84E+00	1,69E-07	4,84E+00
Nb94	3,95E+02	3,88E+06	3,95E+02	3,88E+06	3,94E+02	3,88E+06	3,94E+02	3,87E+06	3,94E+02	3,87E+06
Ni59	1,33E-04	6,15E+05	1,33E-04	6,15E+05	1,33E-04	6,15E+05	1,33E-04	6,14E+05	1,33E-04	6,14E+05
Rb87	7,58E-07	1,45E-02	7,58E-07	1,45E-02	7,58E-07	1,45E-02	7,58E-07	1,45E-02	7,58E-07	1,45E-02
Rh101	1,45E-09	2,47E-01	2,69E-11	4,59E-03	4,96E-14	8,46E-06	9,13E-17	1,56E-08	1,37E-18	2,34E-10
Rh102	7,72E-06	8,30E+02	6,56E-16	3,75E-06	0,00E+00	1,43E-08	0,00E+00	5,53E-11	0,00E+00	1,36E-12
Rh102m	6,71E-02	4,52E-02	0,00E+00	1,34E-03	0,00E+00	5,20E-06	0,00E+00	2,01E-08	0,00E+00	4,97E-10
Ru106	3,58E-08	1,06E+08	8,69E-14	2,57E+02	0,00E+00	3,51E-07	0,00E+00	4,78E-16	0,00E+00	0,00E+00
Se79	6,12E-14	7,64E+01	6,12E-14	7,64E+01	6,12E-14	7,64E+01	6,11E-14	7,64E+01	6,11E-14	7,64E+01
Si32	8,21E-20	1,15E+01	7,53E-20	1,05E+01	6,58E-20	9,24E+00	5,74E-20	8,00E+00	5,24E-20	7,00E+00
Sn126	9,62E+00	2,25E+02	9,62E+00	2,25E+02	9,62E+00	2,25E+02	9,62E+00	2,25E+02	9,62E+00	2,25E+02
Sr90	2,00E+06	4,19E+07	1,27E+06	2,65E+07	6,15E+05	1,29E+07	2,99E+05	6,26E+06	1,85E+05	3,87E+06
Tc97	9,79E-07	2,70E-05	9,79E-07	2,70E-05	9,79E-07	2,70E-05	9,79E-07	2,70E-05	9,79E-07	2,70E-05
Tc97m	6,12E-10	2,40E-02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
Tc98	5,94E-04	1,54E-02	5,94E-04	1,54E-02	5,94E-04	1,54E-02	5,94E-04	1,54E-02	5,94E-04	1,54E-02
Tc99	2,35E+03	3,18E+04	2,35E+03	3,18E+04	2,35E+03	3,18E+04	2,35E+03	3,18E+04	2,53E+03	3,18E+04
celkově	4,08E+07	4,23E+10	4,57E+06	3,57E+09	7,05E+05	1,37E+08	3,08E+05	5,41E+07	1,89E+05	4,71E+07

U Zircaloy-4 bylo zjištěno zvýšení u 36 radionuklidů které jsou uvedeny v následující tabulce, u dalších 6 nebyly po přidání nečistot zaznamenány nějaké změny a nejsou zde uvedeny. Mezi nimi měli největší krátkodobou aktivitu radionuklidy Sb125 a Fe55 v řádu  $10^{10}$  Bq, z dlouhodobého hlediska pak Zr93 s aktivitou  $1,0E+07$ . Největší zvýšenou aktivitu v krátkém období vykazuje Co60, jehož aktivita dosahuje hodnot Sb125 a Fe55. Dlouhodobě největší aktivitu v pokrytí má radionuklid C14. Mezi radionuklidy s významným nárůstem aktivity patří Ar39, Ca41, Cl36, Cs135 Cs137, Kr85, Mo93, Nb91 a Ni59.

## Zhodnocení a závěr

Cílem této bakalářské práce bylo zjistit vliv nečistot v jaderném palivu a strukturálních materiálech na výskyt a aktivitu radionuklidů v chlazení po dobu 100let. Po přidání nečistot do paliva a krytí došlo k nárůstu aktivity některých radionuklidů a ke vzniku nových.

Co se týče paliva UO<sub>2</sub>, u 36 z celkových 97 radionuklidů, které se vyskytovali již ve vyhořelém palivu bez nečistot, byla zjištěna vyšší aktivita. Nejvyšší dlouhodobě aktivitu vykazoval radionuklid C14 o hodnotě 1,73E+08 Bq, jehož aktivita tvoří více než polovinu celkové aktivity po 80 letech chlazení. Obdobnou aktivitu měl v 1. roce chlazení i radionuklid H3, u kterého ale časem aktivita rapidně klesá.

U pokrytí z materiálu Zircaloy-4 došlo ke zvýšení aktivity téměř všech radionuklidů. Pouhých 6 ze 42 radionuklidů zůstalo beze změny. Krátkodobě nejaktivnější radionuklid je Co60. Při porovnání nárůstů celkových aktivit u obou materiálů si lze všimnout, že vyššího nárůstu dosáhli radionuklidy v pokrytí Zircaloy-4. V obou případech, jak v palivu, tak v pokrytí, má na celkovém zvýšení aktivity, hlavně v dlouhodobém hledisku, vliv hlavně 1 radionuklid.

Nejvíce změn proběhlo v pokrytí Zircaloy-4, kde počet nových radionuklidů i počet radionuklidů se zvýšenou aktivitou byl větší než u paliva UO<sub>2</sub>. V Zircaloy-4 vzniklo 61 nových radionuklidů, v palivu 29. V obou případech byl z dlouhodobého hlediska nejaktivnější radionuklid Ni63. Stejně jako u zvýšené aktivity i u nových radionuklidů platí, že celková jejich celková aktivita je z většiny pouze z jednoho radionuklidu, v případě nových radionuklidů Ni63.

Nečistoty mají velký vliv na zvýšení aktivity radionuklidů či jejich tvorbu, nicméně v případě nejaktivnějšího radionuklidu v palivu, Cs137, přidání nečistot nijak neovlivnilo jeho aktivitu.

## Literatura

- [1] Impurities in LWR fuel and structural materials, Silja Häkkinen [online]. Dostupné z: [http://kyt2022.vtt.fi/pdf/raportit2019/KARAHDE\\_Impurities\\_in\\_LWR\\_fuel\\_and\\_structural\\_materials.pdf](http://kyt2022.vtt.fi/pdf/raportit2019/KARAHDE_Impurities_in_LWR_fuel_and_structural_materials.pdf)
- [2] ] URANYUM BİLEŞİKLERİNDE SAFSIZLIK ANALİZLERİ, S. ACARKAN. L. GÜRELİ, S. ALBAYRAK [online] Dostupné z: [https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/\\_Public/31/018/31018473.pdf?r=1](https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/31/018/31018473.pdf?r=1)
- [3] Advanced fuel pellet materials and designs for water cooled reactors, IAEA [online]. Dostupné z: <https://www.osti.gov/etdeweb/servlets/purl/20563847#page=134>
- [4] Comparative chemical and structural analyses of two uranium dioxide fuel pellets, Tyler L. Spano [online] Dostupné z: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022311518316295?casa\\_token=b8IsezdPEdYAAAAA:EXIDfjSTy6G5B4LqpT73Db\\_i-k4Anw39zJ5rYm36wxXEyjiEFVHXXIDB7D3skH19sedw5-a5Lh4](https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022311518316295?casa_token=b8IsezdPEdYAAAAA:EXIDfjSTy6G5B4LqpT73Db_i-k4Anw39zJ5rYm36wxXEyjiEFVHXXIDB7D3skH19sedw5-a5Lh4)
- [5] Diffusion in undoped and Cr-doped amorphous UO<sub>2</sub>, Megan W. Owen, [online] Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022311523000405>
- [6] Oxidation behavior of Zirconium, Zircaloy-3, Zircaloy-4, Zr-1Nb, and Zr-2.5Nb in air and oxygen; Jordan L. Vandegrift, Patrick M. Price, John-Paul Stroud, Clemente J. Parga, Isabella J. Van Rooyen, Brian J. Jaques, Darryl P. Butt; [online] Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352179119300146#tbl0001>
- [7] Estimation of the radionuclide inventory in LWR spent fuel assembly structural materials for long-term safety analysis; Stefano Caruso; [online] Dostupné z: [https://www.researchgate.net/publication/282118853\\_Estimation\\_of\\_the\\_radionuclide\\_inventory\\_in\\_LWR\\_spent\\_fuel\\_assembly\\_structural\\_materials\\_for\\_long-term\\_safety\\_analysis](https://www.researchgate.net/publication/282118853_Estimation_of_the_radionuclide_inventory_in_LWR_spent_fuel_assembly_structural_materials_for_long-term_safety_analysis)
- [8] Characterization of different forms of Zr-2.5Nb samples before and after neutron irradiation; Chinthaka Silva; [online] Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921509318300789>
- [9] Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo neutron and photon transport code [online] Dostupné z: <https://serpent.vtt.fi/serpent/>
- [10] LEPPÄNEN, Jaakko. Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code [online]. Dostupné z: [http://montecarlo.vtt.fi/download/Serpent\\_manual.pdf](http://montecarlo.vtt.fi/download/Serpent_manual.pdf)

- [11] Novak, Ondrej & Frýbort, Jan & Sklenka, Lubomir & Rataj, Jan & Chvala, Ondrej.  
(2018). SCALE AND SERPENT TWO-GROUP CROSS-SECTION DATA  
GENERATION. Acta Polytechnica CTU Proceedings. 19. 7. 10.14311/APP.2018.19.0007.



## Přílohy

### Příloha A – Vstupní soubor VVER-1000 bez nečistot

```
/*  
* Definice materiálu *  
***/
```

```
% --- Palivo UO2 obohaceno o 3%  
% Teplota nastavena na 900 K
```

```
mat fuelNoGad -10.412 tmp 900.0 rgb 255 255 150 burn 1  
92235.02c -0.0264  
92238.02c -0.8551  
8016.02c -0.1185
```

```
% --- Plášť ze Zircaloy-4
```

```
mat Zircaloy4 -6.53 tmp 610 burn 1  
8016.01c -1.19276E-03  
24050.01c -4.16117E-05  
24052.01c -8.34483E-04  
24053.01c -9.64457E-05  
24054.01c -2.44600E-05  
26054.01c -1.12572E-04  
26056.01c -1.83252E-03  
26057.01c -4.30778E-05  
26058.01c -5.83334E-06  
40090.01c -4.97862E-01  
40091.01c -1.09780E-01  
40092.01c -1.69646E-01  
40094.01c -1.75665E-01  
40096.01c -2.89038E-02  
50112.01c -1.27604E-04  
50114.01c -8.83732E-05  
50115.01c -4.59255E-05  
50116.01c -1.98105E-03  
50117.01c -1.05543E-03  
50118.01c -3.35688E-03  
50119.01c -1.20069E-03  
50120.01c -4.59220E-03  
50122.01c -6.63497E-04  
50124.01c -8.43355E-04
```

```
% --- Voda s 650 ppm rozpuštěné kapaliny borité  
% Teplota nastavena na 578 K
```

```
mat water -0.717 tmp 610 rgb 200 200 255  
0-16.01c 3.330861e-01  
H-1.01c 6.663259e-01  
B-10.01c 7.186970e-05  
B-11.01c 2.892846e-04
```



Nečistoty jaderného paliva a strukturálních materiálů a jejich vliv na zadní část palivového cyklu  
Vojtěch Sem 2023

```
ww ww ff ff ff ff ff ff ii ff ff ff ff ii ff ff ff ff ff ww ww ww ww ww ww ww  
ww ww ff ff ff ff ff ff ff ff ii ff ff ff ff ff ff ff ww ww ww ww ww ww ww ww  
ww ww ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ww ww ww ww ww ww ww ww ww  
ww ww ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww  
ww ww ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww  
ww ww ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ff ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww  
ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww  
ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww
```

% ---plocha okolo palivového souboru je šestihranný válec typu x s poloměrem 11,8 cm

```
surf s1 hexxc 0.0 0.0 11.8
```

% --- Buňka c1 patří do základního universa 0, Je vyplněna mřížkou lat1  
% a pokrývá vše uvnitř povrchu s1

```
cell c1 0 fill lat1 -s1
```

% ---Buňka c1 patří do základního universa 0,  
% a pokrývá vnější povrchu s1

```
cell c2 0 outside s1
```

```
/*  
* Parametry chodu *  
*/
```

% --- hustota výkonu nastavena na 0,04 kw/g

```
set powdens 40.0E-3
```

% --- hraniční podmínka periodická

```
set bc 3
```

% --- Neutronová populace: 2000 neutronů za cyklus, 500 aktivních / 20 neaktivních cyklů

```
set pop 2000 500 20
```

% --- XY-plot

```
plot 3 900 900
```

% --- XY-meshplot

```
mesh 3 900 900
```

```
/*  
* Nastavení pro výpočet vyhořívání *  
*/
```

% --- body vyhoření pro výpočet vyhořívání (v Mwd/kgU)

```
dep butot 0.1 0.5 1 4 6 8 10 12 14 16 18 20 24 28 32 36 40 45 50

% --- Rozpad po vyjmutí paliva z reaktoru
% roky: 1. 2. 3. 4. 5. 6. 7. 8. 9. 10. 15. 20. 25. 30. 35. 40. 50. 60. 70.
80. 90. 100.
dep decstep 365 365 365 365 365 365 365 365 365 365 1825 1825 1825 1825 1825 1825 3650 3650 3650
3650 3650 3650

% --- Calculate material volumes before simulation by
% sampling 10 million random points in the geometry.
% Specifying the material volumes is crucial in burnup calculations

set mcvol 10000000

% --- Inventář nuklidů

set inventory all

% --- Použití metody korektor-prediktor pro řešení vyčerpání

set pcc leli 10 10

% --- Nastavení módu optimalizace
set opti 1

% --- Nastavení cest ke knihovnám

set acelib "/media/sf_bp/serpent_data/sss_endfb80.xsdata"

set declib "/media/sf_bp/serpent_data/sss_endfb80.dec"

set nfylib "/media/sf_bp/serpent_data/sss_endfb80.nfy"

% --- Snížení energetické sítě pro úsporu paměti

set egrid 0.1 1e-9 15
```