

## ПУТИ ДИФФУЗИИ РАДИОНУКЛИДОВ В ГЛИНИСТЫХ МИНЕРАЛАХ

Ван Цайлунь

Научный руководитель: Мышкин В. Ф., д.ф.-м.н., профессор  
Томский политехнический университет, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30  
E-mail: caylun1224@gmail.com

Многообразие типов кристаллических решеток и их структурных особенностей обеспечивает различные механизмы сорбции радиоактивных отходов (РАО) на минералах, образующих глину. Чем больше энергия взаимодействия иона и кристаллита, тем надежнее фиксации на глине радионуклидов. Механизм взаимодействия между РАО и глинистыми минералами различен в зависимости от химических свойств радионуклидов, типа глинистых минералов и условий окружающей среды.

Различные химические свойства радионуклидов, типы глинистых минералов и различные условия окружающей среды определяют разные механизмы их взаимодействия. Существует два основных механизма взаимодействия радионуклидов, с обменом катионов из глины и из водного раствора. В первом случае происходит краевая адсорбция и далее ионный обмен между в межслоевом пространстве глины. Например, радиоактивные элементы щелочных металлов и щелочноземельных металлов ( $^{90}\text{Sr}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ) могут напрямую диффундировать между слоями глины путем катионного обмена, заменяя подвижные ионы. Во втором случае ион в основном взаимодействует с краевым центром и перемещается по поверхности [1].

На рис. 1 приведена картина распределения энергии связи иллита с ионами  $\text{Li}^+$  (a),  $\text{Rb}^+$  (b),  $\text{Cs}^+$  (c). Сравнение рисунков показывает, что схожи распределения по расчетной ячейке потенциальной энергии связи ионов  $\text{Rb}^+$  и  $\text{Cs}^+$  с кристаллитом иллита. Сравнение энергий связи ионов  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Rb}^+$ ,  $\text{Cs}^+$  с кристаллитом иллита позволяют выявить имеющуюся закономерность - энергия связи изменяется в диапазоне 24,451-24,476 эВ. При этом геометрические размеры потенциальных ям и барьеров для  $\text{Rb}^+$  больше, чем для  $\text{Cs}^+$ . Необходимо отметить, что смежные потенциальные ямы для энергии связи иллита с ионами  $\text{Li}^+$  практически сливаются (см. рис. 1,а).

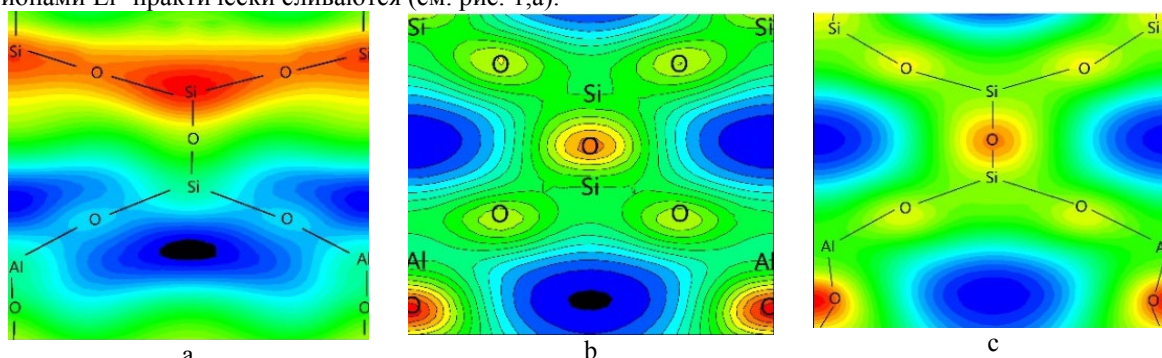


Рис. 1. Распределение по расчетной ячейке энергии связи иллита с ионами  $\text{Li}^+$  (a),  $\text{Rb}^+$  (b),  $\text{Cs}^+$  (c)

Области, имеющие энергию связи в некотором диапазоне, можно объединить в несколько групп. Для этого на рис. 1,б приведены линии, разделяющие 16 областей энергий связи, в которых энергия находится в диапазоне  $E_{i+1} - E_i = 1,7 \text{ эВ}$ . В таблице 1 приведены статистические данные областей равных энергий, в которой вместо общей части всех чисел «244» использован «\_».

Таблица 1. Распределение по расчетной ячейке энергии связи иона  $\text{Rb}^+$  и иллита

№ зоны	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12-15	16
минимальная энергия, эВ	_76.1	_74.4	_72.8	_71.1	_69.5	_67.8	_66.1	_64.5	_62.8	_61.2	_59.5	_52.9	_51.2
доля площади, %	7,6	11,3	5	7,1	8,8	8,4	18,5	13,4	6,7	7,6	2,5	2,2	0,8

Основная часть времени ион  $\text{Rb}^+$  находится над областью «1», где энергия связи не превышает 24476,1 эВ. При этом площадь области с минимальной энергией не превышает 7,6% от общей площади расчетной ячейки. Поэтому с высокой вероятностью можно считать, что начальной точкой перехода при диффузии является область «1». Расчетные коэффициенты диффузии ионов щелочных металлов значительно меньше экспериментально определяемых величин. Это указывает на невозможность диффузии ионов щелочных элементов внутри кристаллита сухого иллита.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Крупская В. В., Бирюков Д. В., Белоусов П. Е., Лехов В. А., Романчук А. Ю., Калмыков С. Н. Применение природных глинистых материалов для повышения уровня ядерной и радиационной безопасности объектов ядерного наследия // Радиоактивные отходы. — 2018. — № 2 (3). — С. 30—43.