

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Синьсинь В., Шаша У. Закономерности формирования, особенности структуры и свойств ударопрочных защитных покрытий // Научная инициатива иностранных студентов и аспирантов российских вузов: сборник докладов X Всероссийской научно-практической конференции, Томск, 22-24 апреля 2020 г. – Томский политехнический университет, 2020. – С. 74-78.
2. Ван С. Исследование структурно-фазового состояния и физико-механических свойств защитных нанокompозитных покрытий системы Zr-Y-O на поверхности кремния. – 2020. – С. 43– 45.
3. Шаша У. Закономерности формирования, особенности структуры и свойства ударопрочных защитных покрытий системы Si-Al-N. – 2020. – С. 43– 45.

Ван Цайлунь (Китай)

Томский политехнический университет, г. Томск

Научный руководитель: Мышкин Вячеслав Федорович,  
д.ф.-м.н., профессор

## МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ИЛЛИТА, СОДЕРЖАЩЕЙ РАЗНОЕ КОЛИЧЕСТВО ВОДЫ

### Введение

В связи с использованием ядерной энергии и радиоактивных материалов, а также сжиганием угля значительное внимание уделяется противодействию радиоактивному загрязнению окружающей среды. Широко распространено геологическое захоронение радиоактивных веществ в глинистые слои. Ошибки в технологии могут привести к выносу радионуклидов из области захоронения, что может нанести значительный ущерб среде обитания человека [1]. Поэтому актуальны исследования по улучшению геологического хранения радионуклидов.

Свойства глинистых минералов формировать барьер для радионуклидов во многом зависят от количества поглощенной воды. Величина и распределение абсорбированной воды между слоями глинистых минералов, толщина которой может изменяться от 8 до 28 Å, определяется расположением атомов кислорода на поверхности. Устойчивость слоя молекулярной воды обуславливается геометрическим соотношением

ем кислородных атомов или гидроксильных групп силикатного каркаса глинистого минерала.

Такие минералы, как иллит, вермикулит, успешно использовались при сорбции радионуклидов. Обменная емкость, характеризующая способность к реакциям обмена катионами, различна у различных глин и выражается количеством обменных катионов, содержащихся в 100 г сухого вещества [2]. Величина емкости катионного обмена для различных глинистых минералов, мг-экв/100 г: каолинит – 3-15, галлуазит  $2\text{H}_2\text{O}$  – 5-10, галлуазит  $4\text{H}_2\text{O}$  – 40-50, монтмориллонит – 80-150, иллит – 80-150 [3].

Абсорбция электролитов зависит от природы сорбента и вида ионов. Глинистые минералы имеют слоистую структуру, между которыми затягиваются молекулы воды и катионы. При сорбции ионов из растворов полярные микроучастки глины адсорбируют катионы, которые создают на внешней поверхности частиц глины двойной электрический слой. Для катионов существует так называемый ряд Гофмейстера [2], в котором катион может вытеснить при адсорбции все ионы, находящиеся правее:  $\text{H}^+ > \text{Al}^{3+} > \text{Ba}^{2+} > \text{Sr}^{2+} > \text{Ca}^{2+} > \text{Mg}^{2+} > \text{Cs}^+ > \text{Rb}^+ > \text{NH}_4^+ > \text{K}^+ > \text{Na}^+ > \text{Li}^+$  [4]. Например, хотя ионы  $\text{Li}^+$  и  $\text{Na}^+$ , обладающие меньшим диаметром, большей гидратной оболочкой, хуже адсорбируются, чем ионы  $\text{Rb}^+$  и  $\text{Cs}^+$ .

#### Подробности моделирования

Моделирование методом молекулярной динамики (MD) может быть использовано для интерпретации результатов экспериментальных исследований, тестирования и совершенствования теоретических моделей. MD обеспечивает уникальный взгляд на интеркаляцию глинистых минералов и их поверхностную активность.

В работе приводятся результаты моделирования свойств иллита, в модели которой использована пространственная группа  $C2/m$ . Формулу элементарной ячейки иллита можно написать в виде  $\text{KAl}_5\text{Si}_7\text{O}_{20}(\text{OH})_4$ . Основные параметры ячеек в модели были получены из эмпирических моделей, введенных в работе [5]:  $a = 0.523$  нм,  $b = 0.908$  нм, значение  $c = 2.04$  нм,  $\alpha = \gamma = 90^\circ$ ,  $\beta = 95.64^\circ$ . Модель, использованная нами для расчетов, включала два слоя глинистого минерала, каждый из которых содержал  $1 \times 2 \times 1$  элементарных ячеек ( $\text{KAl}_5\text{Si}_7\text{O}_{20}(\text{OH})_4$ ).

В тетрагональном слое иллита атомы Al заменяют Si. Поэтому суммарный заряд слоя иллита составляет 1 e на одну элементарную ячейку. При этом молекулярный слой заряжен отрицательно, из-за чего к нему притягиваются катионы из межслоевого пространства.

На рис. 1(а) показана исходная структура расчетной ячейки. При выполнении расчетов обменные ионы располагали в середине межслой-

ного пространства, а молекулы воды располагали вокруг контрионов. Видно, что ионы  $Mg^{2+}$  и  $Ca^{2+}$  легче абсорбируются в меж слоевое пространство глины. Из четырех остальных ионов  $Cs^+$  и  $K^+$  хуже сорбируются глиной.

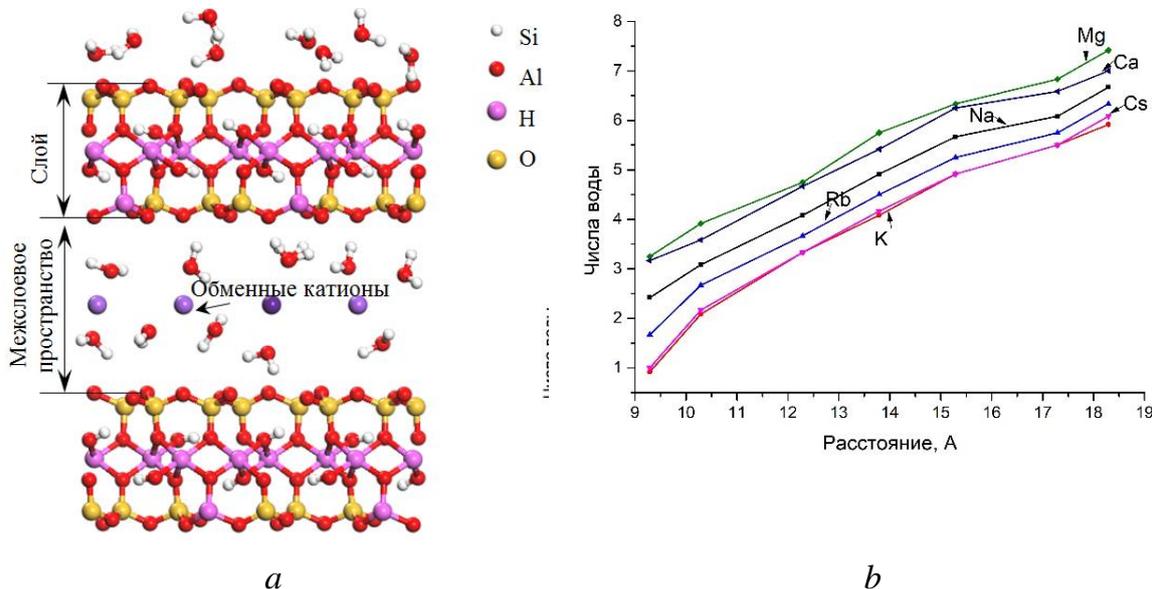


Рисунок 1. а - исходная структура суперячейки;

б - изменение количества адсорбированных молекул воды по мере увеличения расстояния между слоями

Чем больше количество молекул воды находится в межслоевом пространстве глинистого минерала, тем больше толщина межслоевого пространства. Однако, предположение о том, что абсорбционная способность катионов в промежуточный слой минерала, содержащий молекулы воды, не зависит от размера ионов, нуждается в дополнительном подтверждении.

На втором этапе для моделирования методом MD использовали систему, содержащую  $4 \times 3 \times 1$  ячеек. Первоначальная система составлена из ячеек, геометрия которых оптимизирована ранее. Ансамбль NVT (канонический ансамбль: количество частиц (N), объём (V) и температура (T) постоянны, и постоянный суммарный импульс) используется для получения траекторий частиц в оптимизированной системе с разрешением 500 пс. Каждые 500 шагов используются в качестве основы для получения и сохранения данных для анализа профилей концентрации, среднеквадратических сдвигов (MSD) и коэффициентов самодиффузии.

Моделировали распределение  $Cs^+$  и  $Na^+$  и воды в межслоевом пространстве глины. На рис. 2 показан профиль плотности каждой компоненты вдоль оси z, перпендикулярной слоям минерала.

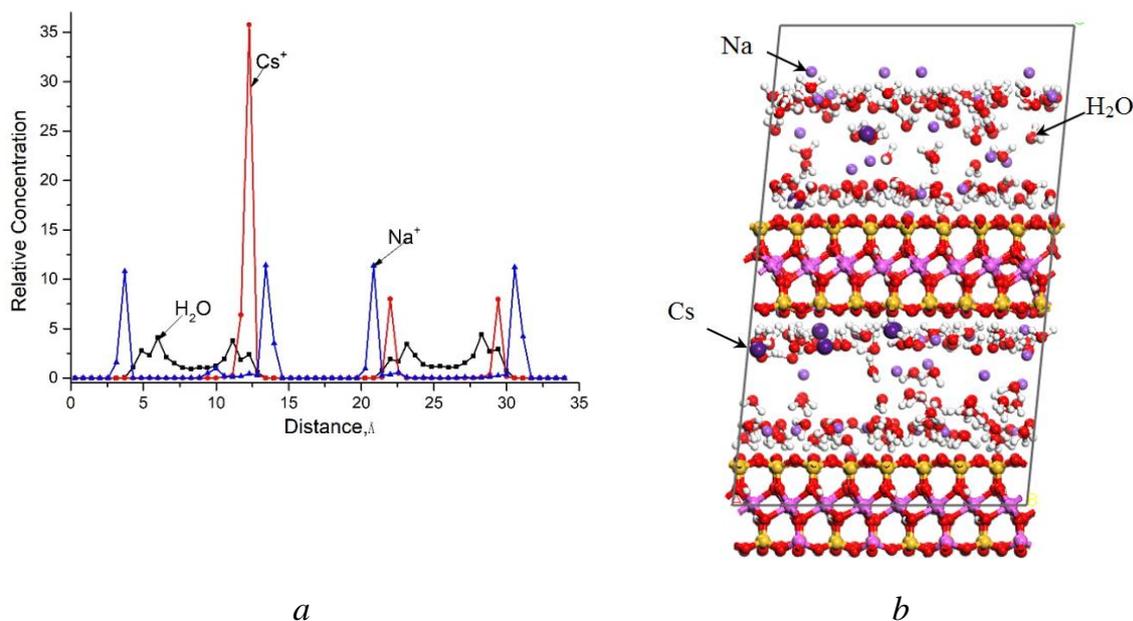


Рисунок 2. Моделирование молекулярной динамики прогнозирование профилей средней плотности воды и ионов как функции расстояния в направлении, нормальном к поверхности глинистого минерала (a), a (b) – структурная схема расчетной ячейки

Из рис. 2 видно, что для всех трех частиц профили концентраций имеют два пика на разных расстояниях от поверхности слоя глинистого минерала. Например, для Иллита максимумы концентрации находятся на расстояниях  $z = 3.65 \pm 0.28 \text{ \AA}$  и  $z = 12.27 \pm 0.18 \text{ \AA}$ . Очевидно, что Cs<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup> и молекулы воды притягиваются к поверхности слоя глинистого минерала в местах распределения отрицательного заряда. В распределении концентрации, в направлении, перпендикулярном слоям, видно четкое расслоение, что согласуется с данными работы [6]. По данным этой работы при межслоевом расстоянии около 12.5 Å молекулы воды будут разделены на два слоя. При этом Na<sup>+</sup> с меньшим ионным радиусом находится ближе к поверхности слоя глинистого минерала и может преимущественно находиться в середине шестиугольной структуры, включающей атомы кислорода на поверхности глины.

### Выводы

1. Результаты моделирования показывают, что в межслоевом пространстве глины наблюдается объединение молекул воды в две плоские области, что облегчает абсорбцию катионов в глину.
2. При равном межслоевом расстоянии глины, содержащей двухзарядные ионы (Mg<sup>2+</sup>, Ca<sup>2+</sup>), в ней содержится больше молекул воды.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мокров Ю.Г. Алексахин А.И. Мониторинг – основа обеспечения безопасности при выполнении работ по консервации водоёма Карачай // Радиоактивные отходы. – 2018. – № 3(4). – С. 60–68.
2. Galabutskaya, E.A. Clay-water system: a manual on a special course of ceramics technology for students of the Faculty of Chemical Technology / E.A. Galabut. - Lviv: Lviv Polytechnic Institute, 1962. - 212 p.
3. Ralph E Grim, Clay mineralogy // Graw-Hill Series in Geology: McGraw-Hill, 1953. - 384 p.
4. Allen, Nicholas, "Cation Adsorption and Exchange at the Mineral-Water Interface: The Role of Hydration and Hydrolysis." Thesis, Georgia State University, 2017.
5. Wyckoff. Crystal Structures. 2nd edition, vol. 4. Miscellaneous Inorganic Compounds, Silicates, and Basic Structural Information. Chichester and New York (Wiley: Interscience), 1968. - 566 p.
6. Zhang, X., Yi, H., Zhao, Y., Min, F., & Song, S. (2016). Study on the differences of Na- and Ca-montmorillonites in crystalline swelling regime through molecular dynamics simulation // Advanced Powder Technology, 27(2), P 779–785.

Гомес Корредор Давид Умберто (Колумбия)

Волгоградский государственный технический университет, Волгоград

Научный руководитель: Ионкина Елена Сергеевна, к.п.н, доцент

### **ПРЕДЛОЖЕНИЕ ПО ВНЕДРЕНИЮ КАЧЕСТВЕННЫХ ИНСТРУМЕНТОВ В НЕПРЕРЫВНОМ СОВЕРШЕНСТВОВАНИИ ПРОЦЕССА ИЗГОТОВЛЕНИЯ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННЫХ УСТРОЙСТВ**

**ABSTRACT** - This article presents a proposal to greatly reduce the level of defects in a production line of a company whose main sector is manufacturing, mainly resorting to the discipline of quality engineering in terms of the application of statistical tools of control; addressing the field of telecommunications by means of a practical example of production process and assembly of radio frequency transmitters.

#### **I. ВВЕДЕНИЕ**

В статье раскрываются проблемы, которые очень часто возникают в сфере производства, в связи с получением продуктов с характери-