

0,3 МГр. Смесь находилась при комнатной температуре и атмосферном давлении. Плотность облучаемой смеси составляла $1,4 \text{ г/см}^3$.

ЕКО высушенной глины определяли по ГОСТ 17.4.4.01-84. Экспериментально получено значение ЕКО природной глины составляло 26,725 (мг экв.)/100 г. В результате радиационного воздействия на глину её ЕКО уменьшилась на 8,725 (мг экв.)/100 г. Известно, что ЕКО определяется удельной поверхностью частиц глины и количеством противоионов между пакетами минерала. Также известно, что ионизирующее излучение приводит к формированию точечных дефектов в структуре минерала. Известна публикация, в которой показано, что полная аморфизация (разрушение кристаллической структуры) глинистого минерала происходит, при облучении бетта-частицами, происходит при поглощенной дозе около 10^{10} Гр. Поэтому разрушения, получаемые минералами при поглощенной дозе гамма-излучения 0,3 МГр, не столь значительны.

В докладе анализируются причины уменьшения величины ЕКО. Например, изменение ЕКО может произойти в результате уменьшения удельной поверхности глины. Второй причиной изменения ЕКО может быть изменение заряда железа, содержащегося в пакетах глинистого минерала, в результате взаимодействия с гамма-излучением. Из сертификата на используемую смесь видно, что содержание оксида железа составляет 3,85 %. Также теоретически анализируются возможное влияние температуры и давления на радиационное разрушение различных минералов. Эти условия связаны с возможным «отжигом» минерала, определяющем конечную концентрацию дефектов.

ИЗМЕНЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФфуЗИИ ПРОТивоИОНОВ ПРИ ПОЯВЛЕНИИ РАЗРЫВА ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В СТРУКТУРЕ ГЛИНИСТОГО МИНЕРАЛА

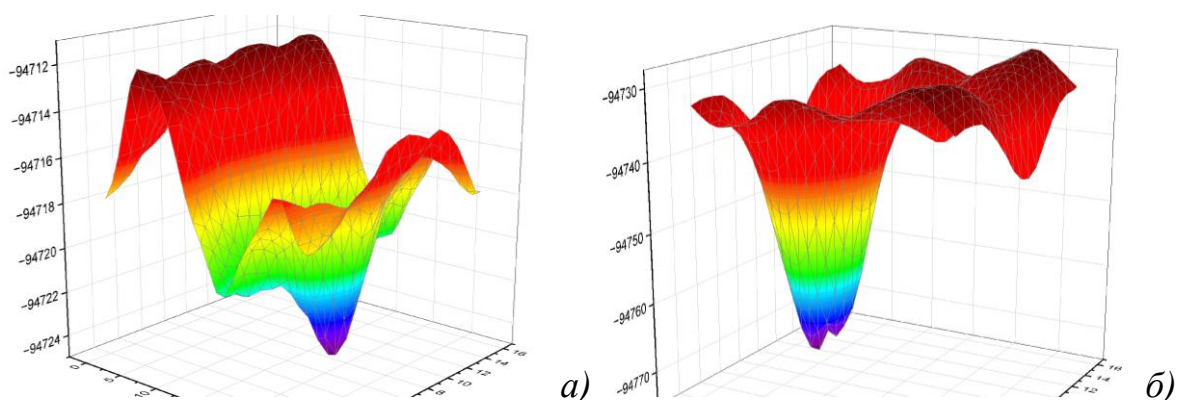
Шукшина Д.Д., Ван Цайлунь

*Научный руководитель: Мышкин В.Ф., д.ф.-м.н., профессор
Томский политехнический университет,
634050, г. Томск, пр. Ленина, 30
E-mail: dds17@tpu.ru*

Для создания инженерных барьеров безопасности при захоронении радиоактивных отходов (РАО) используют смеси, обогащенные монтмориллонитом. При контакте с РАО в кристаллической структуре минерала появляются дефекты, которые ухудшают его барьерные свойства. Это увеличивает вероятность попадания радионуклидов в окружающую среду.

Квантово-химическое моделирование позволяет имитировать различные дефекты. Анализировали влияние вакансии в тетраэдрическом слое минерала на его барьерные свойства. Materials Studio контролирует количество молекулярных орбиталей. Поэтому для заполнения недостающих ковалентных связей использовали радикалы $\bullet\text{H}$ или $\bullet\text{OH}$.

Путем квантово-химического моделирования рассчитывали энергию взаимодействия ионов Na^+ , Li^+ , Cs^+ , Rb^+ , находящихся между пакетами монтмориллонита, с расчетной ячейкой. Суперячейка, использованная для расчетов, содержала один пакет из 3×3 ячеек. Результаты расчетов приведены на рисунках: а – исходный минерал, б – минерал с дефектом.



Из рисунков видно, что, для исходного минерала, в котором отсутствует вакансия, потенциальная яма наблюдается в точке замены Al^{3+} на ион Mg^{2+} в октаэдрическом слое, в связи с появлением заряда. Глубина ямы составляет 3 эВ для одного моля расчетных ячеек.

При наличии дефекта формируется более глубокая яма, чем в исходной структуре. При этом глубина ямы равна 30 эВ. Логично предположить, что при этом коэффициент диффузии катионов должен уменьшаться из-за продолжительного нахождения катиона в этой точке, представляющей для катиона потенциальную яму. Это противоречит экспериментальным результатам. В докладе анализируются возможные причины несоответствия экспериментальных данных расчетным результатам.