

## ВЗАИМНОЕ ВЛИЯНИЕ КАТИОНОВ НА ИХ КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ ЧЕРЕЗ ГЛИНИСТЫЕ МИНЕРАЛЫ

Ван Ц., Шукшина Д.Д., Атутова Я.Е.

*Научный руководитель: профессор ТПУ Мышкин В.Ф.  
Томский политехнический университет, г. Томск  
E-mail: yeab@tpu.ru*

Изучение взаимодействия радионуклидов с глинистыми минералами представляет собой актуальное направление, влияющее на безопасность хранения радиоактивных отходов. С увеличением объемов радиоактивных отходов необходимо не только оптимизировать методы их захоронения, но и предсказывать возможные пути миграции радионуклидов в глубоких слоях Земли. В настоящее время недостаточно изучены процессы взаимодействия катионов радионуклидов с глинами в различных условиях.

Мы моделировали процесс диффузии катионов через уплотненный слой набухшей глины в программе Materials Studio. Использовался Na-вермикулит, у которого между пакетами глины содержится  $\text{Na}^+$ . При этом часть межпакетных ионов натрия заменяли на ионы  $\text{Cs}^+$  или  $\text{Rb}^+$ , имеющими эквивалентный заряд. Также заменяли два иона натрия на один двухвалентный катион  $\text{Mg}^{2+}$  или  $\text{Ba}^{2+}$ .

Моделирование методом молекулярной динамики проводили при условии постоянной плотности глины. Расчеты показывают, что катионы в межпакетном пространстве глины распределены не равномерно, а сгруппированы в слои. Также видно, что катионы распределены неравномерно в межпакетном пространстве. Это связано с тем, что в изучаемой нами расчетной модели атомы Si, находящиеся в тетраэдрах, замещены на Al лишь на одной стороне пакета глины. При этом катионы сильнее адсорбируются поверхностью с одной стороны пакета, содержащего большее количество замененных атомов пакета.

Перемещение катионов в межпакетном пространстве глины с одной точки в другую точку возможна при условии, если энергия их тепловых колебаний превышает величину потенциальной ямы. При этом концентрация зарядов тетраэдрического слоя пакета вермикулита, которая определяет энергию взаимодействия с ионами, оказывает наибольшее изменение коэффициента диффузии катионов при изменении температуры.

Установлено, что влияние температуры на диффузию воды намного больше, чем на миграцию катионов. При низкой гидратации глин температура незначительно влияет на диффузию воды и катионов, а размер и масса гидратированного иона оказывают сильное влияние на его диффузию между пакетами и сорбцию. В докладе приводятся ре-

зультаты расчетов коэффициента диффузии между пакетами разных ионов и обсуждаются полученные результаты моделирования; обосновываются причины взаимного влияния катионов.

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАЗРУШЕНИЯ ГЛИНИСТЫХ МИНЕРАЛОВ В ПОЛЕ БЕТА-ИЗЛУЧЕНИЯ**

*Сергеев О.С., Чеботарев К.Р.*

*Научный руководитель: Мышкин В.Ф., д.ф.-м.н., профессор  
Томский политехнический университет,  
634050, Россия, г. Томск*

В свете резкого обострения экологических проблем во второй половине XX века, включая вероятность радиоактивное заражения, вопрос обращения с радиоактивными отходами стал предметом особого внимания. Глинистые материалы являются наиболее перспективными, когда рассматривается вопрос о конструировании хранилищ для радиоактивных отходов (РАО).

Глинистые минералы подвергаются эрозионному проникновению радиоактивных отходов при глубинном захоронении РАО. Ионизирующее излучение РАО и пучки тяжелых ионов формируют в глине дефекты, которые вызывают изменения физико-химических свойств вышеупомянутых материалов. Поэтому необходимо исследовать процесс разрушения глинистых материалов для обеспечения требуемых характеристик и предсказуемости их поведения на протяжении всего жизненного цикла объекта консервации или захоронения РАО, выполненного с применением глинистых материалов.

В докладе приводятся результаты моделирования радиационных повреждений минерала монтмориллонит в поле  $\beta$ -излучения. Определена зависимость количества образовавшихся вакансий в мишени, имитирующей монтмориллонит (ММТ), от поглощенной дозы. Показана линейная зависимость количества радиационных разрушений от поглощенной дозы в диапазоне 0–0,4 МГр. Очевидно, что количество выбиваемых атомов пропорционально их концентрации и сечению взаимодействия с бета-частицами. При этом количество выбитых атомов разного вида существенно отличаются из-за отличия их концентраций. Определены конечные координаты атомов, выбиваемых из решетки мишени под воздействием ионизирующего излучения, что позволяет определять, атомы каких элементов в ММТ наиболее чувствительны к воздействию  $\beta$ -излучения и какие области пакетов минерала наиболее чувствительны к излучению.