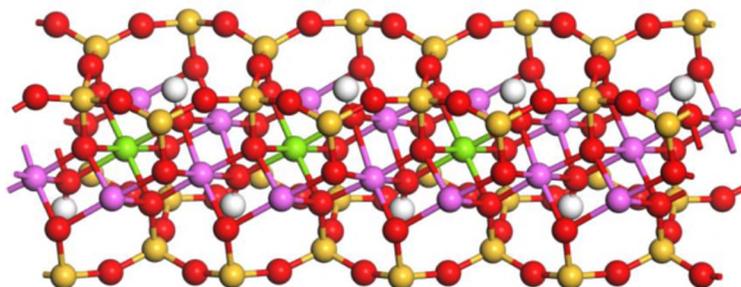


ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ОТ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ МОНТОРИЛЛОНИТА

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

В настоящее время для создания инженерных барьеров безопасности при захоронении радиоактивных отходов зачастую используют монтмориллонит. Монтмориллонит – глинистый минерал, характеризующийся трехэтажной решеткой: октаэдрический слой Al^{3+} расположен между двумя тетраэдрическими слоями Si^{4+} . Между трехэтажными ячейками располагаются вода (так называемая, межслоевая) и катионы щелочных и щелочноземельных металлов. Замена в октаэдрических слоях алюминия на ионы Mg^{2+} , как показано на рисунке, приводит к появлению заряда в минеральной структуре.



Кристаллическая структура монтмориллонита: Al – сиреневый, Si – желтый, O – красный, Mg – зеленый.

Путем квантово-химического моделирования рассчитывали коэффициенты диффузии ионов K^+ в межслоевом пространстве монтмориллонита. Результаты расчетов для 5 из возможных вариантов замены алюминия на магний приведены в таблице.

$D_1, м/с^2$	$D_2, м/с^2$	$D_3, м/с^2$	$D_4, м/с^2$	$D_5, м/с^2$
$2,8134 \cdot 10^{-13}$	$2,1601 \cdot 10^{-13}$	$2,0014 \cdot 10^{-13}$	$2,9875 \cdot 10^{-13}$	$4,4214 \cdot 10^{-13}$

Из таблицы видно, что коэффициент диффузии ионов K^+ между слоями зависит от положения ионов Mg^{2+} в слоях. Наибольшим коэффициент диффузии наблюдается при симметричном распределении заряда между слоями и наименьшем содержании магния в составе монтмориллонита. Чем больше коэффициент диффузии, тем больше проникающая способность радионуклидов. В связи с тем, что минеральный состав монтмориллонита является непостоянным, требуются дальнейшие исследования коэффициента диффузии. Это позволит увеличить срок эксплуатации пунктов захоронения радиоактивных отходов.

В докладе обсуждаются результаты моделирования изменения коэффициента диффузия катионов в межслоевом пространстве монтмориллонита.