

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования



**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Направление подготовки/профиль 03.06.01 Физика и астрономия / 1.3.9 Физика плазмы
Школа Инженерная школа ядерных технологий (ИЯТШ)
Отделение Отделения ядерно-топливного цикла (ОЯТЦ)

**Научный доклад об основных результатах подготовленной
научно-квалификационной работы**

Тема научного доклада
Исследование барьерных свойств минералов глины, используемых при захоронении РАО

УДК 539.217:666.32:621.039.75

Аспирант

Группа	ФИО	Подпись	Дата
A9-09	Ван Цайлунь		

Руководителя профиля подготовки

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Мышкин Вячеслав Федорович	д.ф.-м.н.		

Руководитель отделения

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заведующий кафедрой	Горюнов Алексей Германович	д.т.н.		

Научный руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Мышкин Вячеслав Федорович	д.ф.-м.н.		

Томск – 2023 г.

АННОТАЦИЯ

Научно-квалификационная работа посвящена распространению ионов щелочных и щелочноземельных элементов через природный и облученный слоистые минералы и состоит из введения, 5 глав, заключения, списка литературы. Работа изложена на 113 странице машинописного текста, содержит 31 рисунков, 8 таблицы, 46 формул, 146 источников цитируемой литературы.

Ключевые слова: молекулярная динамика, радиоактивные отходы, глины, моделирование, монтмориллонит, иллит.

Актуальность: В связи с широким использованием ядерной энергии в повседневной жизни, количество радиоактивных отходов увеличивается с каждым годом. Поэтому представляет актуальность изучение процессов взаимодействия радионуклидов с глинистыми минералами, направленное на ограничение попадания радиоактивных отходов в жилую сферу обитания человека.

Целью работы является формирование научных основ для разработки инженерных барьеров безопасности пунктов подземного захоронения радиоактивных отходов ядерной энергетики.

Задачи исследования.

1. Квантово-химическое моделирование процессов, протекающих при миграции катионов между пакетами глинистого минерала, а также взаимодействии радиационного излучения радионуклидов.
2. Сравнение распределения частиц между пакетами вермикулита по методу молекулярной динамики.
3. Анализ влияния катионов щелочноземельных металлов на их гидратации и миграции между пакетами монтмориллонита.

Публикации: По материалам научно-квалификационной работы опубликовано 20 печатных работ, включая 7 статей в рецензируемых научных журналах рекомендованных ВАК РФ, индексируемые базами данных «Web of Science» и «Scopus».

Во введении отражена актуальность работы, сформулированы основные цели и задачи, показана научная новизна и практическая значимость исследования, обозначены основные научные положения, выносимые на защиту.

В первой главе рассматриваются теоретические и экспериментальные работы по изучению факторов, влияющих на миграцию разных частиц в слоях глины. Подробно рассмотрены кристаллическая структура и свойства набухания разных глины, а также адсорбция на поверхности. Проанализированы некоторые существующие результаты моделирования и экспериментальных измерений диффузии. Представлен пример разных типов источников излучения, а также доз, которые вызывают повреждение структуры разных глин.

Во второй главе представлено распределение энергии между пакетами иллита в отсутствие воды при воздействии разных катионов Li^+ , Cs^+ и Rb^+ . При этом анализируется миграция катионов в межпакетном пространстве ненабухающего иллита.

В третьей главе рассмотрено влияние температуры на миграцию межпакетных катионов при одинаковом количестве молекул воды. Рассматривается влияние катионов щелочных и щелочноземельных металлов на распределение и миграция ионов Na^+ между пакетами.

В четвертой главе обсуждается влияние катионов металлов большого радиуса на набухание и катионное удерживание монтмориллонита, когда Sr^{2+} , Ba^{2+} частично замещают ионы Ca^{2+} в кальциевом монтмориллоните. Проанализировано взаимодействие катионов щелочных металлов, имеющих разные радиусы, с поверхностью глинистого пакета и с молекулами воды.