**Влияние оксидов Nd3+, La3+, Ce4+ на структуру и радиационную стойкость боросиликатных матриц.**

***Иванов Д.В.***

*Студент, 5 курс специалитета*

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Институт материалов современной энергетики и нанотехнологии (ИМСЭН-ИФХ), Москва, Россия*

*E-mail: id6800@mail.ru*

Обращение с высокоактивными отходами (ВАО) является важной проблемой современной атомной энергетики. Захоронение ВАО производится с использованием многобарьерной системы защиты, включающую этап иммобилизации отходов в подходящую по физико-химическим и радиационным свойствам матрицу. В настоящее время самыми распространёнными для иммобилизации ВАО являются матрицы на основе боросиликатных стёкол с добавлением оксидов различных элементов. К преимуществам данного подхода относится то, что такие составы имеют высокую гидролитическую, химическую, термическую и радиационную устойчивость. Кроме того, важными достоинствами боросиликатных стёкол являются их высокая способность к растворению широкого диапазона элементов, возможность гибкого подбора состава матрицы под определённый тип отходов и относительная простота промышленного производства.

Ввиду высокой активности включенных в стеклянную матрицу компонентов необходимо прогнозировать радиационную стойкость стекла на всё время захоронения, которое может достигать сотен тысяч лет. Экспериментально отслеживать изменения радиационной устойчивости матрицы в течение такого продолжительного периода невозможно. Решить данную проблему можно использованием методов теоретического моделирования.

Моделирование процессов синтеза и облучения матрицы заданного состава было выполнено методами молекулярной динамики в программе DLPOLY 4[1]. Был создан компьютерный код, позволяющий отслеживать структурные изменения в стекле при радиационной нагрузке. Результаты теоретического моделирования были сопоставлены с экспериментальными данными, полученными для стеклянной матрицы Na2O**·**4Li2O**·**3B2O3**·**19SiO2 и при включении в нее оксидов Ce4+, Nd3+, La3+ до и после облучения высокоэнергетическими электронами. Изучение структуры и состава стекла было проведено с помощью различных физико-химических методов анализа, в том числе твердотельного ЯМР, XANES и рамановской спектроскопии.

*Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В.Ломоносова.*

**Литература**

1. Todorov I. T. et al. DL\_POLY\_3: new dimensions in molecular dynamics simulations via massive parallelism //Journal of Materials Chemistry. – 2006. – Т. 16. – №. 20. – С. 1911-1918