

Атомистическое моделирование структуры и свойств монтмориллонита месторождения 10-Хутор как материала инженерных барьеров безопасности при захоронении радиоактивных отходов.

Научный руководитель – Еремин Николай Николаевич

Михайлова Полина Сергеевна

Аспирант

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: mihaylova.pol@yandex.ru

Для обеспечения безопасности при размещении радиоактивных отходов (РАО) важной задачей является исследование процессов, которые могут происходить в системе инженерных барьеров после закрытия пункта окончательной изоляции РАО. Зачастую экспериментальные исследования этих процессов оказываются затруднены, что связано со сложностями, определяемыми свойствами внедряемых радионуклидов, а также значительными временными затратами. В данном случае методы атомистического структурного моделирования позволяют дополнить результаты экспериментальных исследований, а также послужить альтернативой им.

Расчёты производились с использованием методов классического атомистического моделирования. Объект настоящего исследования – система монтмориллонит – водный раствор в присутствии радионуклидов Cs^+ , I^- . Анализ процессов взаимодействия монтмориллонита и наиболее значимых радионуклидов в водной среде является перспективным направлением исследований, так как монтмориллонит – основной компонент бентонитовых глин, которые используются в качестве одного из основных материалов каскада мультибарьерной защиты благодаря их высоким сорбционным свойствам, набухаемости и низкой водопроницаемости. За основу модели монтмориллонита был взят состав образцов месторождения 10-й Хутор (Россия, Хакасия):

$(\text{Ca}_{0.15}\text{Mg}_{0.02}\text{Na}_{0.02})[(\text{Al}_{1.54}\text{Fe}^{3+}_{0.17}\text{Fe}^{2+}_{0.05}\text{Mg}_{0.25})(\text{Si}_{3.91}\text{Al}_{0.09})\text{O}_{10}(\text{OH})_2]$. При моделировании был использован набор эффективных зарядов атомов и потенциалов межатомного взаимодействия ClayFF [1], который позволяет с высокой точностью воспроизводить структурные и макроскопические физические свойства глинистых минералов, а также описывать взаимодействия различных ионов с гидратированными поверхностями этих соединений.

В настоящей работе были исследованы структурные и динамические характеристики системы монтмориллонит – водный раствор CsI , получены данные по адсорбции молекул воды и радионуклидов (Cs^+ , I^-) на поверхностях частиц монтмориллонита.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [2].

Источники и литература

- 1) Cygan R., Greathouse J. and Kalinichev A. , Advances in ClayFF molecular simulation of layered and nanoporous materials and their aqueous interfaces, The Journal of Physical Chemistry C, 125(32), p. 17573-17589, (2021).
- 2) Voevodin Vl., Antonov A., Nikitenko D., Shvets P., Sobolev S., Sidorov I., Stefanov K., Voevodin Vad., Zhumaty S.: Supercomputer Lomonosov-2: Large Scale, Deep Monitoring and Fine Analytics for the User Community. In Journal: Supercomputing Frontiers and Innovations, Vol.6, No.2 (2019). pp.4–11. DOI:10.14529/jsfi190201.