**Сорбция циркония на кварце и бентоните**

***Киселева С.С.***

*Студентка, 6 курс специалитета*

*МГУ имени М.В.Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия*

*e-mail: sophiekiselyova@ya.ru*

Благодаря высокой эффективности, надёжности и относительной экологической безопасности атомная отрасль обладает существенными преимуществами при получении электроэнергии в современном мире и продолжает развиваться. Одной из важных задач производства энергии из ядерного топлива является обращение с радиоактивными отходами, в том числе с материалами, содержащими долгоживущий изотоп циркония 93Zr с периодом полураспада 1,61 миллиона лет. Цирконий-93 образуется в значительных количествах как при делении ядер урана и плутония, так и в результате нейтронной активации широко применяемых конструкционных материалов, делая их непригодными для дальнейшего использования на атомных электростанциях. Вопрос оценки безопасности при захоронении циркония-93 до сих пор остаётся не до конца решённым, поскольку его миграционное поведение на сегодняшний день изучено недостаточно.

В случае выхода радионуклидов из материала матрицы при проникновении подземных вод внутрь хранилища одним из основных процессов, препятствующих их миграции, выступает сорбция на минералах. Данное исследование посвящено изучению сорбции циркония из водных растворов на кварце – одном из основных компонентов природной среды – и бентонитовой глине, используемой в качестве барьерного материала при захоронении радиоактивных отходов. Сорбционное поведение циркония исследовано в диапазоне значений pH от 0 до 14. Необходимое значение рН устанавливали добавлением хлорной кислоты или гидроксида натрия. Начальная концентрация циркония(IV) составляла 10-7 моль/л. Концентрации циркония и фоновых элементов среды в растворах измерялись методом ICP-MS. Сорбция циркония на кварце составляет практически 100% на интервале pH от 1 до 12 и падает до нуля в сильнокислой области. Значения сорбции на бентоните ниже, достигают максимума при pH от 2 до 4. Константа сорбции циркония на кварце получена на основе расчётов полной энергии Гиббса составляющих с учётом энергии сольватации и избыточного заряда поверхности. Коэффициенты активности рассчитаны в рамках теории специфического взаимодействия ионов (SIT). Данные по сорбции циркония на кварце, полученные экспериментальными и расчётными методами DFT, сопоставлены и связаны в единую математическую модель. Константа сорбции на бентоните оценена на основе экспериментальных данных.

Результаты работы могут быть применены для решения практических задач, связанных с обоснованием безопасности хранилищ радиоактивных отходов, и для дальнейших исследований поведения циркония в окружающей среде.