**Теоретическое моделирование химической устойчивости и температуры плавления стеклянных матриц применяемых для захоронения высоко активных отходов**

***Сибриков К.А.1***

*Студент, 5 курс специалитета*

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, факультет ИМСЭН-ИФХ, Москва, Россия*

*E-mail: kirillsib6@gmail.com*

На данный момент одной из главных проблем атомной энергетики является накопление большого количества радиоактивных отходов, образующихся на каждом этапе обращения с топливом – от производства и до захоронения. Ввиду развития концепции закрытого ядерного топливного цикла (ЗЯТЦ) в России, отработавшее ядерное топливо (ОЯТ) подвергается переработке результате которой образуются высокоактивные отходы (ВАО), которые необходимо захоранивать. В соответствии с принципом радиоэквивалентности захораниваемые отходы не должны по активности превышать изъятый из земли радиоактивный материал. Для предотвращения контакта окружающей среды и радиоактивных отходов на время, необходимое для снижения уровня активности до близкого к природному, используются хранилища с многобарьерной системой защиты. В качестве первичного используются стеклянные и минеральные матрицы, в которые диспергируют радиоактивные отходы.

Одним из ключевых требований к таким матрицам является их высокая радиационная стойкость на протяжении всего времени захоронения, которое составляет сотни или тысячи лет в зависимости от состава ВАО. Таким образом невозможно провести только экспериментальную оценку устойчивости матриц. В настоящее время, разрабатываются новые подходы к моделированию радиолитической и химической устойчивости стеклянных матриц с помощью методов молекулярной динамикии машинного обучения.

В данной работе разработан подход по оптимизации состава матрицы для иммобилизации высокоактивных отходов на основе машинного обучения. Основываясь на данных о составе матриц из открытых баз данных Sciglass и Altglass, были построены модели, предсказывающие температуры плавления стекол и их химическую стойкость (выщелачивание). С помощью DFT TPSSh def2-TZVP уровня теории и Бейдеровского анализа были рассчитаны квантово-химические свойства связей в оксидных фрагментах, составляющих основу стеклянных матриц. На основе полученных данных был разработан подход, который позволяет подобрать минимальный по температуре плавления состав стеклянной матрицы, наиболее устойчивый к выщелачиванию.