

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Ван Цайлунь «Распространение ионов щелочных и щелочноземельных элементов через природный и облученный слоистые минералы», представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.4.9 Ядерные энергетические установки, топливный цикл, радиационная безопасность.

### Актуальность диссертационной темы

В связи с бурным развитием атомной энергетики, обращение с высокоактивными радиоактивными отходами (РАО) и их захоронение в скором времени станет одной из важнейших проблем безопасности и экологии. Это выражается в необходимости безопасного захоронения высокоактивных РАО, образующихся при переработке отработанного топлива на атомных электростанциях, высокоактивных отходов, уже образовавшихся при разработке и производстве ядерного оружия, а также в наличии некоторого количества отработанного топлива, которое на данном этапе не готово к переработке.

В настоящее время считается перспективным захоронение РАО с использованием глинистых минералов в качестве барьера безопасности. В связи с этим тема диссертационной работы Ван Цайлунь, посвященной рассмотрению закономерности взаимодействия катионов радионуклидов с глинистыми минералами и влияния радиации на миграцию катионов, является, несомненно, актуальной.

### Структура и основное содержание работы

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы. Работа изложена на 159 страницах текста, содержит 42 рисунка, 18 таблиц и список литературы из 223 наименования.

**Во введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы цель и задачи исследований, отражены теоретическая и практическая значимость, научная новизна полученных результатов, представлены научные положения, выносимые на защиту.

**В первой главе** приведен обзор литературных данных о выполненных к настоящему времени исследованиях по тематике, связанной с моделированием и экспериментальными исследованиями различных процессов в глинистых минералах. Обобщены сведения о влиянии на межпакетную миграцию катионов в различных условиях, а также о дефектах, возникающих под действием радиации в пакетах глинистых минералов.

**Во второй главе** представлены результаты моделирования энергии взаимодействия катиона  $\text{Li}^+$  с пакетами иллита. Приведены результаты анализа «поля» потенциальной энергии, для поиска наиболее вероятных траекторий диффузии катионов разного радиуса ( $\text{Li}^+$ ,  $\text{Cs}^+$ ,  $\text{Rb}^+$ ) между пакетами глины.

**В третьей главе** приведены результаты компьютерного моделирования различных процессов в вермикулите при низкой гидратации и различных



температурах. Из этих данных определяли коэффициент диффузии катионов между пакетами. При моделировании задавали температуры, характерные для глубинного захоронения РАО. Полученные результаты показывают, что температура оказывает меньшее влияние на катионы, чем на молекулы воды.

**В четвертой главе** приводятся результаты сравнения коэффициентов диффузии катионов щелочных и щелочноземельных металлов, находящихся между пакетами одиночных катионов или их смеси, методом моделирования молекулярной динамики. Результаты квантово-химического моделирования подтверждают, что катионы щелочноземельных металлов с меньшими радиусами предпочтительно образуют внешнесферные комплексы. При этом катионы других элементов сильнее связываются с базальной поверхностью пакета. Поэтому ионы  $Ba^{2+}$ , при одинаковой концентрации, меньше связываются с молекулами воды, чем ионы  $Sr^{2+}$ . Частичный обмен  $Ca^{2+}$  на ионы  $Ba^{2+}$  позволит повысить диффузию  $Ca^{2+}$  между пакетами.

**В пятой главе** представлены результаты ускоренных радиационных испытаний, направленных на установление связи между изменением барьерных свойств и поглощенной дозой. На основе результатов моделирования и экспериментальных исследований коэффициента диффузии катионов  $Na^+$  через радиационно-поврежденную смесь глин оценено время безопасной эксплуатации могильника РАО, находящейся на территории СХК.

### **Научная новизна**

Научная новизна результатов диссертационного моделирования связана с тем, что впервые показано:

1. заряд и закономерности замещения атомов в пакетах вермикулита оказывают значительное влияние на коэффициент диффузии катионов в пространстве между пакетами. При этом: температура оказывает большее влияние на диффузию воды, чем катионов; наблюдается анизотропия коэффициента диффузии катионов между пакетами минерала;
2. двухвалентные ионы преимущественно формируют внешнесферные, а одновалентные – внутрисферные комплексы;
3. расширение минерала при его набухании зависит от размера межпакетных противоионов;
4. при малых дозах облучения уменьшается коэффициент диффузии межпакетных противоионов и увеличивается емкость катионного обмена.

### **Достоверность результатов, обоснованность научных положений и выводов**

Достоверность научных положений и выводов обеспечивается корректным использованием современных сертифицированных средств измерений, апробированных экспериментальных методик, применением известных и квалифицированных методов моделирования и вычислений, многократным повторением экспериментов.

Степень достоверности результатов проведенных исследований обеспечена использованием для моделирования программного обеспечения, используемого многими исследователями, использованием поверенных



приборов и непротиворечивостью результатов расчета с экспериментальными данными и результатами других авторов.

Результаты исследований в диссертации Ван Цайлунь получили теоретическое подтверждение, разработанная технология апробирована на практике, выводы обоснованы.

### **Практическая ценность**

В ходе диссертационного исследования изучали параметры, определяющие коэффициент диффузии катионов щелочных и щелочноземельных элементов, а также сравнивали коэффициент диффузии и емкость катионного обмена смеси глин, определяющие её барьерные свойства, для облученной и необлученной смеси. Результаты этих исследований могут быть использованы при обеспечении техносферной или радиационной безопасности, при проектировании инженерных барьеров безопасности захоронений РАО.

### **Полнота опубликования результатов диссертационной работы**

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 7 статьях в рецензируемых научных журналах, в том числе 5 статей в журналах, индексируемых в Scopus и WoS.

### **Замечания и предложения по диссертационной работе**

1. Замечено некоторое свободное и не всегда обоснованное применение геологических терминов. Например, стр. 6 «*Определение межпакетного распределения частиц* и параметров процессов, протекающих при взаимодействии ионов щелочных и щелочноземельных элементов со слоистыми минералами, используемыми в инженерных барьерах безопасности пунктов захоронений РАО». В грунтоведении принята следующая градация структурных элементов глин по размеру, на примере монтмориллонита: лист- $3\text{\AA}$ , пакет- $14\text{\AA}$  и межпакетное пространство- $5\text{\AA}$ , минерал- $120\text{\AA}$ , коллоид- $10000\text{\AA}$ , агрегаты- $100000\text{\AA}$ . Коллоиды и агрегаты часто называют глинистыми частицами. Поэтому, вопрос как коллоид размером в  $10000\text{\AA}$  можно разместить в межпакетное пространство размером в  $5\text{\AA}$  требует пояснения.

2. Предложенные методы моделирования гидратации ММТ (набухания) на уровне межпакетного пространства представляют определенный интерес, однако необходимо оценить какую часть (значимость) занимает оно в общем набухании (на уровне коллоида, агрегата, минерала).

3. Нестандартное распределение катионов на рис. 3.5 свидетельствует о том, что поверхностный заряд неравномерен по обе стороны глинистого слоя. Почему в работе изучались именно такие экстремальные условия, а не более равномерное распределение заряда?

4. Рисункам 4.7 и 4.9 необходимы более яркие цвета. Темные линии разных цветов трудно отличить друг от друга.



## Общее заключение диссертационной работы

Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, выполненной на актуальную тему, имеющую актуальность, новизну и существенное значение для развития атомной отрасли. Исследования связаны с решением задачи предотвращения проникновения в экосистему радиоактивных веществ, опасных для человека.


Диссертация Ван Цайлунь выполнена на высоком научном уровне.

Содержание диссертации в полной мере соответствует паспорту специальности 2.4.9 Ядерные энергетические установки, топливный цикл, радиационная безопасность. Содержания автореферата и диссертации совпадают в полной мере.

Диссертация Ван Цайлунь «Распространение ионов щелочных и щелочноземельных элементов через природный и облученный слоистые минералы» полностью удовлетворяет требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а соискатель Ван Цайлунь заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.4.9 Ядерные энергетические установки, топливный цикл, радиационная безопасность.

Официальный оппонент:

кандидат геолого-минералогических наук  
по специальности 25.00.08 – Инженерная геология,  
мерзлотоведение и грунтоведение,  
доцент кафедры инженерной геологии и охраны недр  
ФГАОУ ВО «Пермский государственный  
национальный исследовательский университет»  
614990, г. Пермь, ул. Букирева, дом 15.  
Телефон: +7 912 985 05 65  
E-mail: karinealvanyan@yandex.ru

«29» сентября 2023 г.  Алванян Карине Антоновна

Подпись Алванян К.А. заверяю



сентябрь 29.09.2023 /  
*Alvanyan*