

**Теоретические и экспериментальные исследования зависимостей параметров элементарных ячеек La-монацита от содержания примесей Са и Th.**

**Научный руководитель – Ерёмин Николай Николаевич**

**Уланова Амина Сергеевна**

*Студент (магистр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

*E-mail: kara-2796@mail.ru*

Одним из способов иммобилизации является включение компонентов радиоактивных отходов в кристаллическую матрицу минералоподобных материалов, например, фосфатов редкоземельных элементов. В данном исследовании с использованием комплекса теоретических и экспериментальных методов проводится сравнительный анализ кристаллических матриц переменного состава на основе монацита.

Монацит является перспективным кандидатом в качестве матрицы для иммобилизации актинидов [1] из-за его высокой структурной гибкости [2] и физико-химических свойств, включая высокую химическую стойкость [3], а также высокую радиационную стойкость [4]. Метод твердофазного синтеза был успешно применен для твердых растворов  $\text{La}_{1-x}\text{Pu}_x\text{PO}_4$  ( $x = 0,01-1,1$ ) в работах [5,6].

Теоретически была смоделирована структура с общей формулой  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_{0.5x}\text{Th}_{0.5x}\text{PO}_4$  с различным соотношением вхождений Са, Th элементов (где  $x=0,1-0,5$ ). Расчёты проводились в пределе бесконечного разбавления, а также были использованы расчеты свойств смешения твердых растворов методом сверхъячеек. Для расчета использовались  $4 \times 4 \times 4$  сверхъячейки (пр. гр. P1) структурного типа монацита, содержащие 256 Me-позиций. Проведен ряд экспериментальных работ по синтезу образцов структуры монацита с тем же составом. Методом рентгенофазового анализа показано, что в образцах с  $x=0,1$  и  $0,2$ , наблюдаются только рефлексы структуры монацита. Однако в образцах с большим соотношением входящих (Са, +Th)/La, образуется отдельная фаза пирофосфата тория, что может быть связано с неоптимальными условиями синтеза. Продолжением настоящей работы будет поиск более подходящих условий синтеза для включения больших количеств разновалентных элементов в структуру монацита.

**Источники и литература**

- 1) Dacheux, N. и др., 2013; Ni, Y. X. и др., 1995; Boatner, L. A., и др., 2002; Clavier, N., и др., 2011
- 2) Ewing, R. C., и др., 2002; Lumpkin, G. R., и др., 2006; Oelkers, E. H., и др., 2008; Schlenz, H., и др., 2013
- 3) Meldrum, A., и др., 1997; Weber, W. J., и др., 2009; Ewing, R., и др., 1995
- 4) Ni, Y. X.; и др., 2013; Oelkers, E. H., и др., 2002; Gausse, C., и др., 2016
- 5) Popa K. et al (2007) The low-temperature heat capacity of  $(\text{Pu}_{0,1}\text{La}_{0,9})\text{PO}_4$  // Solid State Commun. V. 144, P. 74.
- 6) Zhang, Y.; Vance, E. R. Plutonium in monazite and brabantite: Diffuse reflectance spectroscopy study. J. Nucl. Mater. 2008, 375, 311 – 314.