**Моделирование радиационной устойчивости полиморфов LaPO4 как потенциальных матриц для иммобилизации ВАО**

***Романов К.Я.***

*Студент, 4 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,   
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: kirill.romanov@chemistry.msu.ru*

Для иммобилизации радиоактивных отходов (РАО) используются радиационно стойкие материалы, способные сохранять инертные свойства на протяжение долгого времени. Перспективными материалами для захоронения РАО являются минеральные матрицы из фосфатов редкоземельных элементов.

Основным требованием к матрицам для иммобилизации РАО является их высокая радиационная стойкость, которая должна обеспечиваться на весь период захоронения, который составляет десятки и сотни тысяч лет. Экспериментально проверить устойчивость материалов к дозовым нагрузкам на такой период не предоставляется возможным, поэтому актуальной задачей является компьютерное моделирование процессов, происходящих в матрицах при внутреннем облучении.

В данной работе мы сравнили радиационную стойкость трёх кристаллических модификаций LaPO4. Для этого с помощью методов молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS[1] было проведено моделирование пролёта ядра отдачи 235U внутри кристаллов.

Было рассчитано количество образовавшихся дефектов по методу Вигнера-Зейтца с использованием программы OVITO[2]. На основании полученных графиков определен наиболее устойчивый к облучению полиморф.Для подтверждения термодинамический стабильности образующихся при иммобилизации Pu фаз с помощью программы GULP[3] были рассчитаны энтальпии смешения в ряду LaPO4 – PuPO4.

**Литература**

1. A. P. Thompson, H. M. Aktulga, et.al. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // Comp Phys Comm, 271 (2022) 10817.

2. A. Stukowski, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 18, 015012 (2010)

3. J.D. Gale and A.L. Rohl. The General Utility Lattice Program // Mol. Simul., 29, 291-341 (2003)