

УДК: 621.039.75; 621.039.743

DOI: 10.26277/SECNRS.2025.116.2.002

© 2025. Все права защищены.

ПРИМЕНЕНИЕ ГЕОХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТНОЙ ОЦЕНКИ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ ИНЖЕНЕРНЫХ БАРЬЕРОВ БЕЗОПАСНОСТИ ПУНКТОВ ХРАНЕНИЯ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ

Баранов Д. Ю.* (baranov@secnrs.ru),
Мурлис Д. В.* (murlis@secnrs.ru),
Понизов А. В.*, канд. техн. наук (ponizov@secnrs.ru),
Верещагин П. М.*, канд. техн. наук (vereschagin@secnrs.ru),
Муслимов Д. Д.* (muslimov@secnrs.ru)

Статья поступила в редакцию 23 марта 2025 г.

Аннотация

В статье рассматриваются подходы к применению геохимического моделирования для расчетной оценки сорбционных свойств инженерных барьеров безопасности, которые могут быть использованы при обосновании долговременной безопасности пунктов хранения радиоактивных отходов.

Сформулированы основные положения по выполнению геохимического моделирования при обосновании долговременной безопасности пунктов хранения радиоактивных отходов, даны определения терминов «геохимическое моделирование» и «геохимические условия».

Применение геохимического моделирования продемонстрировано на сорбционной и сорбционно-осадительной моделях миграции урана через бетонный и бентонитовый инженерные барьеры безопасности. Рассмотрено влияние химического состава растворов, контактирующих с материалами инженерных барьеров безопасности, на сорбцию урана и стронция.

► *Ключевые слова: геохимические условия, геохимическое моделирование, пункт хранения радиоактивных отходов, сорбция радионуклидов.*

* Федеральное бюджетное учреждение «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности», Москва, Россия.

APPLICATION OF GEOCHEMICAL MODELING FOR DERIVED ESTIMATE OF SORPTION PROPERTIES OF ENGINEERING SAFETY BARRIERS OF RADIOACTIVE WASTE STORAGE FACILITIES

Baranov D. Yu.*,
Murlis D. V.*,
Ponizov A. V.*, Ph. D.,
Vereshchagin P. M.*, Ph. D.,
Muslimov D. D.*

The article was received by the editors' crew on March 23^d, 2025.

Abstract

This article discusses approaches to the use of geochemical modeling for derived estimate of the sorption properties of engineered safety barriers, which can be used to justify the long-term safety of radioactive waste storage facilities.

Basic provisions for geochemical modeling in substantiation of the long-term safety of the radioactive waste storage facilities are formulated, and the terms “geochemical modeling” and “geochemical conditions” are defined.

The application of geochemical modeling is demonstrated on the sorption and sorption-precipitation models of the migration of the uranium element through concrete and bentonite engineered safety barriers materials. The effect of the chemical composition of solutions in contact with the material of engineered safety barriers on the sorption of uranium and strontium elements is considered.

► **Keywords:** *geochemical conditions, geochemical modeling, radioactive waste storage facility, sorption of radionuclides.*

* Scientific and Engineering Centre for Nuclear and Radiation Safety, Moscow, Russia.

Введение

Федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии, устанавливающие требования к захоронению радиоактивных отходов (РАО) [1, 2], предписывают учитывать геохимические условия при оценке и обосновании долговременной безопасности пунктов захоронения РАО (ПЗРО). Например, согласно приложению № 3 к НП-055-14 [1], при оценке долговременной безопасности системы приповерхностных ПЗРО должны учитываться такие процессы, как геохимическое взаимодействие РАО со средами ближней зоны¹ ПЗРО, образование химических соединений, снижающих изолирующие свойства инженерных барьеров безопасности (ИББ), химическое разложение РАО. Согласно требованиям п. 36 НП-055-14 [1] и пп. 32, 33 НП-069-14 [2], в районе размещения ПЗРО должны быть исследованы геохимические свойства массива горных пород и подземных вод, а также геохимические условия, определяющие выход радионуклидов в окружающую среду, их перенос и накопление.

Согласно положениям п. 71 РБ-042-24 [3], в прогнозные расчеты оценки долговременной безопасности пунктов хранения РАО (ПХРО)² рекомендуется включать, в том числе, химические и термодинамические расчеты.

В документах МАГАТЭ также сформулированы общие положения о необходимости учета геохимических условий при оценке долговременной безопасности системы захоронения РАО. Так, согласно п. А.2 приложения к документу МАГАТЭ [4], для обеспечения критериев безопасности ПЗРО необходимо в долгосрочной перспективе поддерживать в системе захоронения РАО благоприятную геохимическую среду. Согласно п. I.32 приложения I к документу МАГАТЭ [5], геохимические характеристики геологической и гидрогеологической сред должны способствовать ограничению выхода радионуклидов из ПЗРО в окружающую среду или как минимум сдерживанию их миграции.

¹ Ближняя зона – РАО, ячейки захоронения, ИББ, вмещающие и (или) несущие горные породы, измененные в процессе сооружения [6, 7].

² В рамках настоящей статьи под пунктами хранения РАО понимаются объекты использования атомной энергии, предназначенные для хранения особых РАО (пункты размещения и консервации особых РАО) и для приповерхностного размещения РАО без намерения их последующего извлечения (пункты приповерхностного захоронения РАО (ППЗРО), включая ППЗРО-хвостохранилища).

В зарубежной литературе приводятся результаты исследований, связанных с оценками влияния геохимических условий на миграцию радионуклидов в ИББ ПЗРО. Например, в работе [8] отмечается, что долговременные изменения условий (температуры, состава вмещающих пород и продуктов деградации ИББ) влияют на скорость миграции радионуклидов через ИББ. В работе [9] показано, что в долгосрочной перспективе кинетические реакции будут играть ключевую роль в эволюции пористости и степени изменения минералогического состава вмещающих пород. Согласно работе [10], взаимодействие высокощелочных грунтовых вод с бетонными ИББ и горными породами может приводить к изменению геохимических условий на границе раздела ПЗРО и вмещающей породы. Согласно работе [11], по мере прохождения грунтовых вод через массив бетонных ИББ за счет растворения гидратных фаз бетона создается щелочная среда с высокой буферной способностью, при этом скорость миграции радионуклидов становится незначительной за счет сорбционных процессов.

Для расчета сорбционной способности материалов ИББ используется коэффициент распределения K_d [12, 13], который описывается следующим уравнением:

$$K_d = \frac{C_0}{C} * \left(\frac{V}{m}\right),$$

где C_0 – концентрация радионуклида, связанного с твердой фазой, моль;

C – концентрация радионуклида в равновесном растворе, моль;

V – объем раствора, см³;

m – масса образца, г.

Однако сведение множества физико-химических процессов, влияющих на сорбцию радионуклидов, к одному параметру является серьезным недостатком и вносит значительные неопределенности в результаты прогнозных расчетов [14]. Кроме того, необходимо учитывать, что поведение ряда радионуклидов, например урана, существенно зависит от формы нахождения в окружающей среде [15].

1. Влияние геохимических условий на формы нахождения урана

На примере урана рассмотрены основные условия, влияющие на форму его нахождения в природной среде. Основными формами являются четырех- или шестивалентные оксиды, силикаты, фосфаты и другие соединения. Соединения

четырёхвалентного урана слабо растворимы, что определяет их малую подвижность. Следует отметить, что подвижность урана в природных водах напрямую зависит от кислотно-щелочных условий (рН), а валентное состояние – от окислительно-восстановительных (Еh). Смена окислительных условий на восстановительные в диапазонах от 0,2...0,6 В до -0,7...-0,1 В является причиной смены валентности урана с +6 до +4 [16]. Кроме того, анионный состав природных вод влияет на преобладающие соединения урана и его сорбцию [17]. Интервал значений рН, в котором начинается сорбция урана в природных водах, составляет 4,5–5,5 [18], что обусловлено депротонированием на поверхности минералов. В щелочных условиях на поверхности минералов формируются отрицательно заряженные и нейтральные гидроксидные формы, которые не сорбируются на депротонированной поверхности, вследствие чего сорбция урана резко снижается. Таким образом, при геохимическом моделировании следует учитывать окислительно-восстановительные и кислотно-щелочные условия среды миграции.

В работе [19] отмечено, что при одновременном нахождении урана и кальция в растворах следует учитывать образование твердых минеральных фаз оксидов урана: CaUO_4 (уранат кальция) и $\text{Ca}[(\text{UO}_2)_6\text{O}_4(\text{OH})_6] \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ (гидроосуранат кальция), так как они могут значительно снизить миграцию

водных форм урана при его осаждении из раствора в щелочной обстановке.

Формы нахождения урана могут быть представлены в виде Eh-рН диаграмм, на которых отображаются поля устойчивости различных соединений элемента. В качестве примера на рис. 1 приведена диаграмма Eh-рН, показывающая доминирующие водные формы урана в присутствии растворенных анионов (хлоридов, нитратов, карбонатов, сульфатов) и зоны условий, характерных для ПЗРО [20].

Рассматриваемые в настоящей статье подходы к применению геохимического моделирования при расчетном обосновании сорбционных свойств ИББ ПЗРО учитывают формы нахождения урана в системе захоронения РАО.

2. Основные положения по выполнению геохимического моделирования при расчетном обосновании долговременной безопасности пунктов хранения радиоактивных отходов

В федеральных нормах и правилах в области использования атомной энергии, устанавливающих требования к захоронению РАО, отсутствуют определения таких понятий, как «геохимическое моделирование» и «геохимические условия», а в руководствах по безопасности при использовании атомной энергии отсутствуют положения по методическим подходам выполнения геохимического

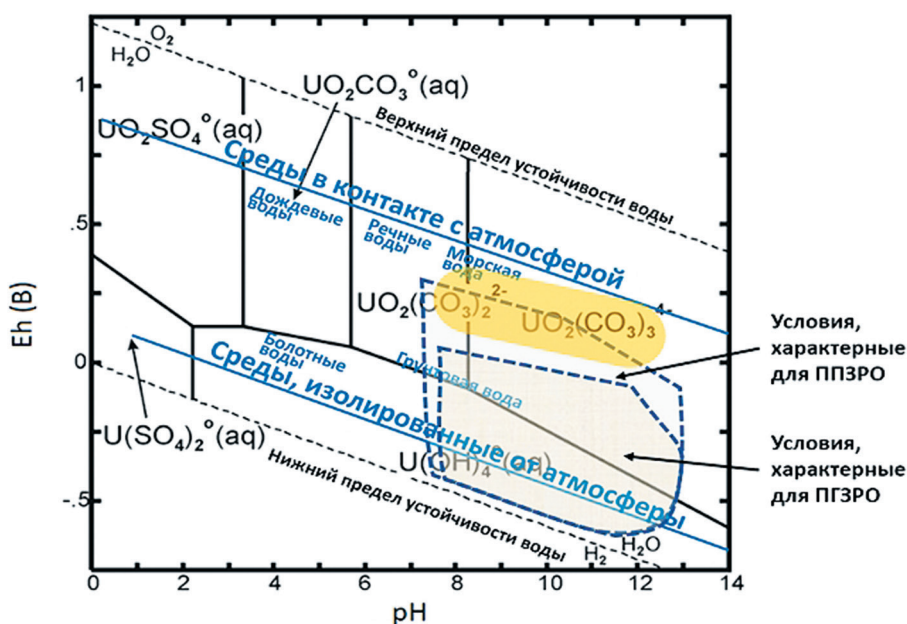


Рис. 1. Диаграмма Eh-рН доминирующих водных форм урана (желтым отмечена область, характерная для условий моделирования, рассматриваемых в разделе 4.1; ПЗРО – пункт глубинного захоронения радиоактивных отходов)

[Fig. 1. Eh-pH diagram of the dominant aqueous forms of uranium (the area typical for the modeling conditions considered in section 4.1 is marked in yellow)]

моделирования и учета геохимических условий. На основании анализа литературы [21–23] применительно к ПХРО этим понятиям можно дать следующие определения:

- *геохимическое моделирование* – это расчетный инструмент для создания моделей химических взаимодействий и преобразований, происходящих в системах размещения и захоронения РАО, который реализуется с использованием законов химической термодинамики и кинетики с целью прогноза поведения и распределения химических элементов и радионуклидов;

- *геохимические условия* – это обстановка, формирующаяся в системах размещения и захоронения РАО и характеризующаяся определенными физическими и химическими условиями, такими как температура, давление, рН, Eh, элементный состав жидкой, твердой и газообразной фаз, в которой происходит перераспределение и преобразование форм химических элементов и радионуклидов.

С использованием геохимических моделей можно моделировать различные типы реакций, в том числе [24]:

- окислительно-восстановительные реакции;
- комплексообразование в растворах;
- осаждение и растворение минералов;
- сорбцию, ионный обмен и поверхностное комплексообразование;
- растворение газов;
- фракционирование химических элементов.

Изменение геохимических условий влияет на [22]:

- скорость выщелачивания радионуклидов из материалов ИББ в ближнюю зону ПЗРО;
- сорбцию/десорбцию радионуклидов материалами ИББ;
- диффузию и адвективно-дисперсионный перенос радионуклидов в ИББ и вмещающих породах ближней зоны;
- эволюцию ИББ (образование вторичных минералов на границе материалов ИББ);
- состав водной и газообразной фаз, растворимость и осаждение минералов, окислительно-восстановительные, кислотные-основные условия среды и другие.

Геохимическое моделирование основывается на следующих положениях [22]:

1. Равновесные и самопроизвольные реакции описываются законами термодинамики.
2. Скорость и механизмы химических реакций с течением времени описываются законами кинетики.

3. Учет многокомпонентности модели осуществляется за счет включения в нее множества фаз (твердые, жидкие и газообразные), различных веществ и реакций.

4. Основные параметры, необходимые для геохимической модели: температура, давление, состав (твердых, жидких, газообразных) фаз, рН, Eh.

5. Ограничения геохимической модели зависят от полноты термодинамических данных (константа равновесия, энтальпия и т. д.) и кинетических параметров (константа скорости реакции и другие).

3. Выбор программы для электронных вычислительных машин при геохимическом моделировании процессов, происходящих в системах размещения и захоронения радиоактивных отходов

В настоящее время в мировой практике используется ряд программ для электронных вычислительных машин (ЭВМ), позволяющих осуществлять геохимическое моделирование в рамках оценки долговременной безопасности ПЗРО, в том числе: «PHREEQC», «MINTEQ», «GWB», «TOUGHREACT», «NETPATH» и «H-CN». Программа для ЭВМ «PHREEQC» является одной из наиболее широко используемых, совершенных по функциональности (около 10 000 ссылок в Google Scholar) программ для задач геохимического моделирования в рамках оценки безопасности ПЗРО [25].

При помощи программы для ЭВМ «PHREEQC» можно моделировать сложные геохимические системы, включая различные типы реакций, с визуализацией полученных результатов. Например, с использованием программы для ЭВМ «PHREEQC» в работе [26] проведено моделирование коррозии стального контейнера РАО в присутствии бентонита, в работе [27] проведена оценка влияния состава раствора на скорость выщелачивания алюмо-фосфатной матрицы остеклованных РАО. Данная программа для ЭВМ была использована для моделирования сорбционных свойств смектита, каолинита и гетита по отношению к урану в условиях миграции радионуклида через почвенную колонку с учетом кинетических реакций, процессов адвекции–дисперсии [28]. В работе [29] была реализована модель сорбции стронция и цезия гидратами силиката кальция – основными твердыми фазами бетона.

Результаты, полученные при помощи программы для ЭВМ «PHREEQC», верифицировались

и валидировались различными специалистами на соответствие экспериментальным данным и результатам, полученным с использованием других программ геохимического моделирования, и продемонстрировали хорошую сходимость [30]. Исходя из сказанного программа для ЭВМ «PHREEQC» была выбрана для решения задач геохимического моделирования в рамках настоящей статьи.

4. Реализация моделирования геохимических условий на примерах расчетного определения сорбционной способности материалов инженерных барьеров безопасности

В настоящей статье описаны подходы к геохимическому моделированию для следующих возможных примеров применения:

1. Расчетное определение сорбционной способности различных материалов ИББ.

2. Влияние состава растворов, контактирующих с материалом ИББ, на сорбцию радионуклидов.

Первый пример демонстрирует возможности геохимического моделирования при определении сорбционной и сорбционно-осадительной способностей различных материалов ИББ. Моделирование осуществляется в динамических условиях, имитирующих одномерный адвективно-дисперсионный перенос урана в модельной колонке.

Второй пример демонстрирует возможности учета химического состава модельных вод на изменение значения K_d урана и стронция. Моделирование осуществляется в стационарных условиях, имитирующих неподвижное взаимодействие модельной воды и материала ИББ (бентонита).

В моделируемых условиях уран находится в шестивалентной форме в виде уранил-иона (UO_2^{2+}), устойчивые состояния которого продемонстрированы на рис. 1 в зависимости от Eh-pH условий.

4.1. Пример расчетного определения сорбционной способности различных материалов инженерных барьеров безопасности

В России и за рубежом широкое распространение в концепциях захоронения РАО в качестве материалов ИББ приобрели составы на основе цемента и глин [31, 32].

Например, в ППЗРО в Свердловской области для заполнения свободного пространства между упаковками РАО используется бентонит или цементно-бентонитовая смесь [33]. В ППЗРО

в Томской и Челябинской областях в качестве буферного материала используется глинопорошок в виде смеси барьерной механоактивированной композиционной, который состоит из каолина, бентонита и вермикулита [34, 35].

Материалы на основе глин рассматриваются как приоритетный буферный материал в большинстве проектов ПЗРО из-за низкой проницаемости и высокой способности к набуханию [36]. Материалы на основе цемента составляют основу конструктивной части ПЗРО, а также упаковок РАО.

Геохимическая модель ближней зоны ПЗРО разработана с целью исследования влияния сорбционной способности материалов, которые используются при создании буферных барьеров в ячейках модульных сооружений ПЗРО. Выполнено сравнение сорбционной способности двух материалов (бентонит и бетон) по отношению к урану.

Для рассматриваемых материалов ИББ в расчетах учитывались следующие минералы:

- монтмориллонит в бентоните;
- тоберморит в бетоне.

Выбор данных минералов обоснован тем, что монтмориллонит является основным минералом, слагающим бентонит, а тоберморит является основной окристаллизованной формой цементного камня, образующейся в гидратированном бетоне [37].

При реализации геохимической модели ближней зоны ПЗРО учитывалась вертикальная нисходящая фильтрация раствора, образованного в результате попадания в ПЗРО атмосферных осадков. В качестве мигрирующего компонента раствора принимался уран.

Модель представляет собой реакционную колонку высотой 4,5 м. Область моделирования разделена на 10 расчетных ячеек высотой по 45 см каждая (рис. 2). Время моделирования составляет 300 лет, что соответствует сроку сохранения работоспособности материалов на основе бетона в условиях захоронения согласно [38]. Адвективно-дисперсионный перенос раствора, содержащего водные формы урана, через реакционную колонку, был смоделирован с использованием одномерных ячеек. Моделирование химических взаимодействий проведено с использованием встроенной в программу для ЭВМ «PHREEQC» базы данных констант химических реакций *l1nl.dat*.

Скорость движения потока принималась равной $1,2 \cdot 10^{-3}$ м/сут. Значение поперечной дисперсивности принималось равным 0,01 м. Согласно условиям модели, каждый год в модельную

колонку, заполненную бетоном или бентонитом, поступает раствор с $pH = 7$, содержащий уран с концентрацией $5 \cdot 10^{-5}$ моль/л. Состав исходного и порового растворов в модельной колонке приведен в таблице № 1 [39, 40].

Сорбция водных форм урана

В геохимической модели учитывалась сорбция урана:

- в бетоне за счет ионного обмена с катионами кальция и комплексообразования на силанольной поверхности тоберморита [41, 42];

- в бентоните за счет ионного обмена с катионами натрия и кальция и комплексообразования на алюмоиольной и силаноиольной поверхностях монтмориллонита [43].

Химические реакции комплексообразования и ионного обмена, учитываемые при моделировании, приведены в таблице № 2.

Следует отметить, что замедление миграции урана в материалах ИББ может происходить по двум типам механизмов:

- сорбционному: учитывается только сорбция урана за счет ионного обмена и комплексообразования;

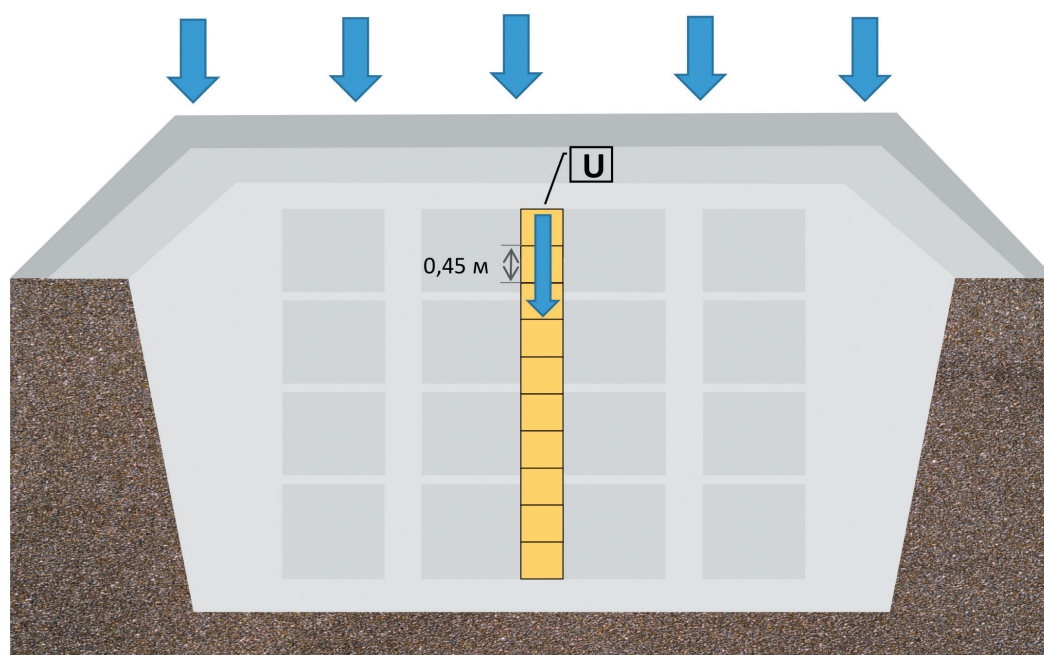


Рис. 2. Схема миграции урана через буферный материал (бентонит или бетон)
[Fig. 2. Scheme of uranium migration through a buffer material (bentonite or concrete)]

Таблица № 1

Состав исходного и порового растворов в модельной колонке Composition of the initial and pore solutions in the model column

Параметр	Исходный раствор	Поровый раствор бетона	Поровый раствор бентонита
pH	7	12,8	7,5
Ca, мг/л	-	40	30
Na, мг/л	200	1 520	180
K, мг/л	-	2 400	10
SO ₄ , мг/л	-	1 470	170
HCO ₃ , мг/л	300	-	35
Cl, мг/л	50	284	220
Si, мг/л	-	2,8	0,1
A, мг/л	-	-	0,1
U, мг/л	12	-	-

Таблица № 2

Реакции комплексообразования и ионного обмена, используемые в моделировании
Complexation and ion exchange reactions used in modeling

Материал	Минерал	Реакция на поверхностном участке минерала	Log K	Ионный обмен	Log K
Бентонит	Монтмориллонит	$\equiv \text{AlOH} + \text{H}^+ \leftrightarrow \equiv \text{Al} - \text{OH}_2^+$	12,3	$\text{UO}_2^{2+} + 2\text{NaX} = \text{UO}_2\text{X}_2 + 2\text{Na}^+$	0,45
		$\equiv \text{AlOH} \leftrightarrow \equiv \text{AlO}^- + \text{H}^+$	-13,6	$\text{UO}_2^{2+} + \text{CaX}_2 = \text{UO}_2\text{X}_2 + \text{Ca}^{2+}$	0,049
		$\equiv \text{AlOH} + \text{UO}_2^{2+} \leftrightarrow \equiv \text{AlO} - \text{UO}_2^+ + \text{H}^+$	7,7	-	-
		$\equiv \text{SiOH} + \text{H}^+ \leftrightarrow \equiv \text{Si} - \text{OH}_2^+$	-0,95	-	-
		$\equiv \text{SiOH} \leftrightarrow \equiv \text{SiO}^- + \text{H}^+$	-6,95	-	-
		$\equiv \text{SiOH} + \text{UO}_2^{2+} \leftrightarrow \equiv \text{SiO} - \text{UO}_2^+ + \text{H}^+$	0,75	-	-
Бетон	Тоберморит	$\equiv \text{SiOH} + \text{UO}_2^{2+} \leftrightarrow \equiv \text{SiO} - \text{UO}_2^+ + \text{H}^+$	2,2	$\text{UO}_2^{2+} + \text{CaX}_2 = \text{UO}_2\text{X}_2 + \text{Ca}^{2+}$	0,049

▪ сорбционно-осадительному: учитывается сорбция урана за счет ионного обмена и комплексообразования, а также осаждение (переход из жидкой фазы в твердую) урана в виде уранатов и гидроксоуранатов кальция (далее – уранаты кальция).

Осадительный процесс будет происходить при нахождении кальция в растворе, поэтому в расчетах учтены разные условия, влияющие на замедление миграции урана.

Результаты геохимического моделирования
Модель сорбционная

Сорбционная модель учитывает только процессы сорбции урана (комплексообразование и ионный обмен) без осаждения уранатов кальция.

На рис. 3 представлено изменение концентрации урана в конечном растворе после взаимодействия с материалами, заполняющими модельную колонку. Концентрация урана в конечных растворах-выщелатах бетона и бентонита спустя 300 лет отличается на три порядка: в выщелате бетона $8,7 \cdot 10^{-7}$ моль/л, бентонита – $1,8 \cdot 10^{-11}$ моль/л.

Расчеты показывают, что через 11 лет концентрация урана в выщелате бетона повышается. Низкая сорбция урана в этот период обусловлена высоким pH порового раствора бетона. По мере разбавления порового раствора исходным раствором с нейтральным pH сорбция урана начинает увеличиваться. При этом изменение концентрации урана в выщелате бентонита в течение 230 лет незначительно, затем наблюдается рост концентрации урана за счет сокращения сорбционной емкости монтмориллонита.

Модель предполагает сорбцию урана на поверхности тоберморита (минерал бетона) и монтморил-

лонита (минерал бентонита) в форме уранил-иона (UO_2^{2+}). Основным механизмом сорбции уранил-иона как на тоберморите, так и на монтмориллоните, является комплексообразование на поверхностных сорбционных центрах (рис. 4). При этом количество молей уранил-иона, сорбированного на монтмориллоните, выше, чем на тоберморите. Число молей уранил-иона на сорбционных центрах силанольных групп ($\equiv \text{SiOH}$) монтмориллонита на 5 порядков ниже, чем на сорбционных центрах алюмоильных групп ($\equiv \text{AlOH}$), что согласуется с более высоким сродством уранил-иона к алюмоильным группам и может быть связано с более низкой тенденцией силанольной группы отдавать водород [44]. Сорбция урана по механизму ионного обмена минимальна: ниже, чем по механизму комплексообразования, на 15 порядков и на 4 порядка – для тоберморита и монтмориллонита, соответственно, что согласуется с данными [45]. Сорбция уранил-иона на оксигидроксидах железа не учитывалась, что могло бы привести к большей степени сорбции уранил-иона.

Модель сорбционно-осадительная

Возможное осаждение уранатов кальция может оказывать значительное влияние на подвижность урана [19]. Поэтому в геохимической модели были рассмотрены варианты миграции раствора через модельную колонку, содержащую бетон и бентонит, с образованием твердых фаз уранатов кальция (рис. 5).

Расчеты показали, что состав конечных растворов-выщелатов бетона и бентонита различается почти в четыре раза: содержание урана в выщелате бетона = $4,5 \cdot 10^{-11}$ моль/л, а в выщелате бентонита = $1,2 \cdot 10^{-11}$ моль/л. За счет влияния осаждения уранатов кальция, роста концентрации урана в выще-

лате бетона на начальном этапе моделирования не происходит. Динамика содержания урана в выщелате бентонита схожа с условиями, не учитывающими осаждение уранатов кальция.

Количество сорбированного уранил-иона, с учетом осаждения уранатов кальция, выше на монтмориллоните, чем на тоберморите (рис. 6).

Как и при условиях, не учитывающих осаждение уранатов кальция, сорбция уранил-иона по механизму ионного обмена незначительна. Количество сорбированных молей уранил-иона за счет механизма комплексообразования на монтмориллоните более чем в три раза превышает количество сорбированных молей уранил-иона на тоберморите.

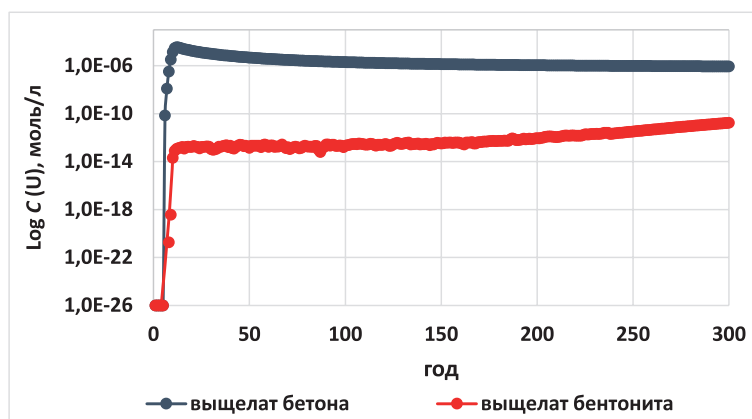


Рис. 3. Содержание урана в выщелате бетона и бентонита [Fig. 3. Uranium content in concrete and bentonite leachate]

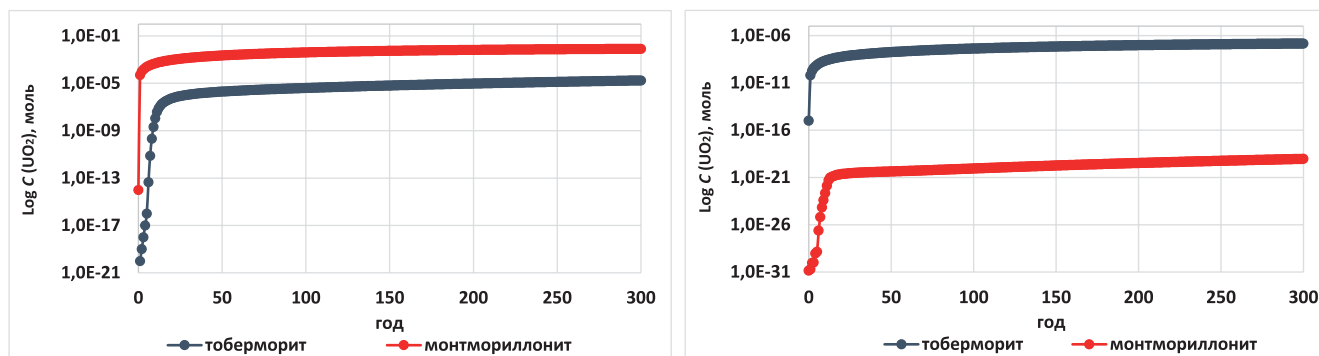


Рис. 4. Количество сорбируемого уранил-иона на поверхности бентонита (монтмориллонит) и бетона (тоберморит) по механизму комплексообразования (слева) и ионного обмена (справа) [Fig. 4. The amount of sorbed uranyl ion on the surface of bentonite (montmorillonite) and concrete (tobermorite) by the mechanism of complexation (left) and ion exchange (right)]

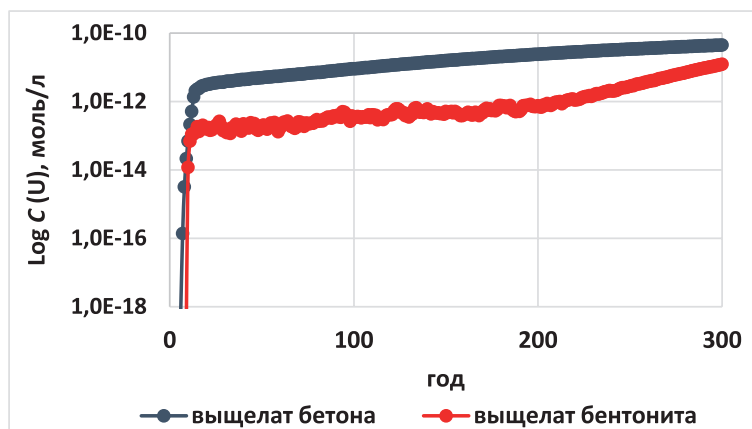


Рис. 5. Содержание урана в выщелате бетона и бентонита с учетом осаждения уранатов кальция [Fig. 5. Uranium content in concrete and bentonite leachate taking into account the precipitation of calcium uranate]

Сравнение сорбционной и сорбционно-осадительной способностей бетона и бентонита

Результаты моделирования показывают, что для колонки, заполненной бентонитом, образование твердых минеральных фаз уранатов кальция замедляет миграцию урана на 30 % по истечении 300 лет ($1,3 \cdot 10^{-11}$ моль/л с учетом осаждения уранатов кальция, $1,8 \cdot 10^{-11}$ моль/л – без учета). В то же время для колонки, заполненной бетоном, осаждение уранатов кальция замедляет миграцию урана более чем на три порядка ($4,5 \cdot 10^{-11}$ моль/л с учетом осаждения, $8,7 \cdot 10^{-7}$ моль/л – без учета). Осаждение уранатов кальция нивелирует высокую подвижность урана в первые 30 лет, а также влияет на количество молей уранил-иона, сорбируемого за счет механизма комплексообразования и ионного обмена (рис. 7).

4.2. Пример расчетного определения влияния состава контактирующих с материалом инженерных барьеров безопасности растворов на сорбцию радионуклидов

Для оценки влияния геохимических условий на сорбцию урана и стронция глинистым материалом ИББ было смоделировано взаимодействие подземных вод разного состава с бентонитовой глиной месторождения «10-й Хутор» (бентонит). При помощи программы для ЭВМ «PHREEQC» была реализована модель, в которой рассматривалось влияние модельных подземных вод с преобладанием карбонатов, сульфатов и нитратов на изменение коэффициента распределения урана и стронция в нормальных условиях ($T = 23 \pm 2$ °C; $P = 1$ бар).

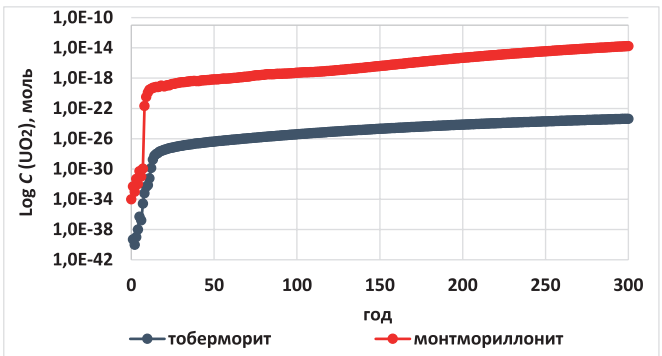
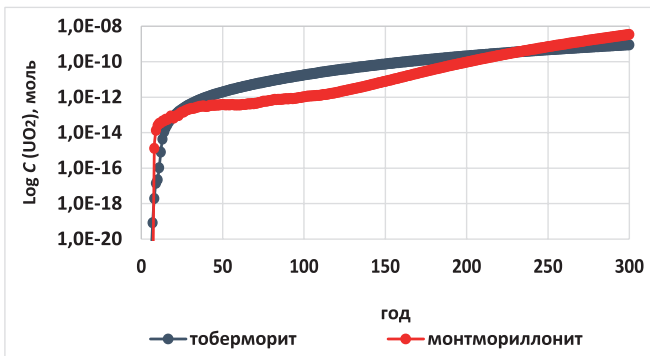


Рис. 6. Количество сорбируемого уранил-иона на поверхности бентонита (монтмориллонит) и бетона (тоберморит) по механизму комплексообразования (слева) и ионного обмена (справа) с учетом осаждения уранатов кальция [Fig. 6. The amount of sorbed uranyl ion on the surface of bentonite (montmorillonite) and concrete (tobermorite) by the mechanism of complexation (left) and ion exchange (right), taking into account the precipitation of calcium uranates]

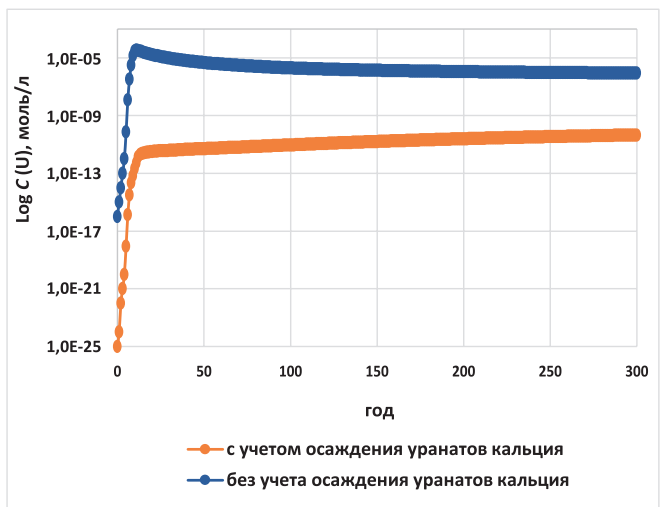
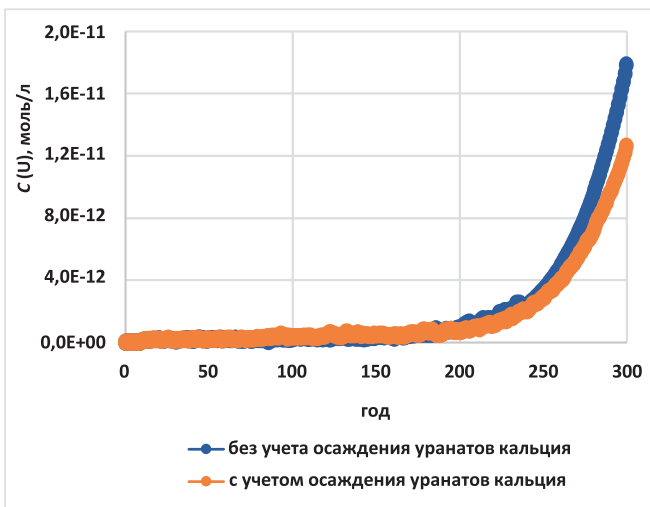


Рис. 7. Содержание урана в выщелате бентонита (слева) и бетона (справа) с учетом и без учета осаждения уранатов кальция [Fig. 7. Uranium content in bentonite leachate (left) and concrete (right) with and without calcium uranate precipitation]

4.2.1. Входные данные модели
Определение состава и основных параметров раствора

Сульфаты, карбонаты и нитраты, содержащиеся в подземных водах, являются наиболее важными неорганическими лигандами, которые влияют на сорбцию и миграцию радионуклидов в геологической среде [46]. Сульфаты присутствуют в грунтовых водах и могут быть причиной проявления сульфатной агрессивности, приводящей к вспучиванию и разрушению бетонных конструкций. Карбонаты могут быть преобладающими среди анионов в щелочных условиях. За счет образования уранил-карбонатных комплексов в значительной степени изменяется подвижность урана. При повышенном содержании углекислого газа в поровом растворе возможно образование угольной кислоты, которая также провоцирует процесс разрушения бетонных конструкций [47]. Нитраты являются ключевым компонентом, влияющим на окислительно-восстановительные условия в грунтовых водах, что также может оказывать значимое влияние на мобильность урана [48].

Состав раствора, используемый при реализации модели, приведен в таблице № 3 [49, 50].

Определение минеральных фаз

Основными минералами, слагающими бентонит, являются монтмориллонит, минералы группы полевых шпатов и кварц. Согласно работе [51] при высоких концентрациях кальция в растворе, реагирующем с бентонитом, возможно пересыщение раствора по уранату и гидроксоуранату кальция. Влияние кварца и полевых шпатов на сорбцию незначительно, а растворения этих минералов в моделируемых условиях не происходит. Исходя из этого каждый тип модельных подземных вод находится в равновесии с монтмориллонитом, беккерелитом и уранатом кальция.

Определение параметров, влияющих на сорбцию урана и стронция

Данные о сорбции урана и стронция были ограничены доступными литературными данными. Согласно [52], удельная поверхность монтмориллонита принималась равной 41 м²/г; количество центров сорбции – 1·10⁻⁶ моль. В таблице № 4 представлены реакции ионного обмена и комплексообразования урана и стронция на силанольной и алюмоильной поверхностях монтмориллонита, которые учитывались в модели [53].

Таблица № 3

Химический состав модельных растворов
Chemical composition of model solutions

Компонент	Подземные воды		
	Преобладание сульфатов	Преобладание карбонатов	Преобладание нитратов
pH	6,1	6,8	7,0
Ca ²⁺ , мг/л	53,2	280	288
Mg ²⁺ , мг/л	50,2	26	15
Na ⁺ , мг/л	5,3	16	30
K ⁺ , мг/л	5,8	-	-
Cl ⁻ , мг/л	2,8	153	215
SO ₄ ²⁻ , мг/л	432	130	82
HCO ₃ ⁻ + CO ₃ ²⁻ , мг/л	124	402	33
NO ₃ ⁻ , мг/л	-	-	230
U ⁶⁺ , мг/л	1,7	1,7	1,7
Sr ²⁺ , мг/л	0,5	0,5	0,5

Таблица № 4

Реакции комплексообразования и ионного обмена на монтмориллоните, используемые в моделировании
Complexation reactions and ion exchange on montmorillonite used in the modeling

Реакция поверхностного комплексообразования	Log K	Ионный обмен	Log K
$\equiv \text{AlOH} + \text{UO}_2^{2+} \leftrightarrow \equiv \text{AlOUO}_2^+ + \text{H}^+$	7,51	$\text{UO}_2^{2+} + 2\text{NaX} = \text{UO}_2\text{X}_2 + 2\text{Na}^+$	0,45
$\equiv \text{AlOH} + 2\text{UO}_2^{2+} + \text{CO}_3^{2-} + 3\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \equiv \text{AlO}(\text{UO}_2)_2\text{CO}_3(\text{OH})_3^{2-} + 4\text{H}^+$	0,99	$\text{UO}_2^{2+} + \text{CaX}_2 = \text{UO}_2\text{X}_2 + \text{Ca}^{2+}$	0,049
$\equiv \text{AlOH} + \text{Sr}^{2+} \leftrightarrow \equiv \text{AlOSr}^+ + \text{H}^+$	-3,35	$\text{NaX} + \text{Sr}^{2+} = \text{SrX}^+ + \text{Na}^+$	0,9
$\equiv \text{SiOH} + \text{UO}_2^{2+} \leftrightarrow \equiv \text{SiOUO}_2^+ + \text{H}^+$	0,75	$\text{Sr}^{2+} + 2\text{X}^- = \text{SrX}_2$	1,16
$\equiv \text{SiOH} + \text{UO}_2\text{OH}^+ \leftrightarrow \equiv \text{SiOUO}_2\text{OH} + \text{H}^+$	4,06	$\text{SrNO}_3^+ + \text{X}^- = \text{SrNO}_3\text{X}$	2,486
$\equiv \text{SiOH} + \text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-} = \equiv \text{SiOHUO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$	8,0	-	-
$\equiv \text{SiOH} + \text{Sr}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \equiv \text{SiOSrOH} + 2\text{H}^+$	-14,3	-	-

4.2.2. Выходные данные.

Результаты моделирования

Количество комплексных соединений и ионообменных фаз, сорбируемых на минералах

По результатам моделирования количество сорбируемых радионуклидов за счет ионного обмена и комплексообразования представлено в таблице № 5. Сорбция по механизму комплексообразования на алюмоиольных краевых участках является преобладающей для урана, основная сорбция стронция происходит по механизму ионного обмена.

Распределение форм элементов

В таблице № 6 представлены результаты расчета основных форм катионов. Ионные формы являются преобладающими для основных катионов (магния, кальция, натрия). Основными формами стронция в изучаемых равновесных растворах подземных вод являются ионная и сульфатная. Основными формами урана являются анионные карбонатные комплексы уранила (2-), их доля возрастает в карбонатных водах. Существенная доля урана (44 %) в нитратных водах находится в форме гидроксокомплекса уранил-иона, доля карбонатных соединений – 40 %.

Расчет коэффициента распределения

Исходя из данных, приведенных в таблице № 6, оценивались значения коэффициентов распределения.

Результаты определения значений коэффициента распределения урана и стронция в различных по составу подземных водах после взаимодействия с бентонитом представлены на рис. 8.

Анализ результатов геохимического моделирования

По результатам моделирования установлено, что преобладание карбонатов в подземных водах способствует значительному сокращению сорбции урана. Значение K_d урана увеличивается в ряду: карбонатные-сульфатные-нитратные подземные воды. Низкая сорбционная способность бентонитов при контакте с сульфатными и карбонатными модельными водами обусловлена формированием устойчивых уранил-карбонатных комплексов, препятствующих сорбции урана на монтмориллоните (основном минерале бентонита). Согласно данным [18], при равновесном pH раствора = 10 значение K_d урана варьируется от 1 до 5 см³/г. Увеличение K_d урана в сульфатных водах, по сравнению с карбонатными, связано со снижением равновесного pH модельного раствора, а также с меньшей долей трудно сорбируемых анионных карбонатных комплексов уранил-иона (таблица № 6). Влияние сульфатов в растворе на сорбцию урана незначительно, т. к. основными формами являются карбонатные комплексы.

Максимальную сорбцию урана в нитратных водах можно связать с низким количеством карбонатных соединений, по сравнению с сульфатными и карбонатными водами. Преобладающей формой урана в нитратных водах является гидроксокомплекс уранил-иона, который осаждается на сорбционных центрах силанольных групп.

Максимальная сорбционная способность бентонита по отношению к стронцию наблюдается для сульфатных вод, минимальная – для карбонатных. Расчетные значения K_d стронция согласуются с работой [18], согласно которой при контакте карбонатных вод с четвертичными глинами значение K_d стронция варьировалось от 40 до 72 см³/г.

Таблица № 5

Сорбция урана и стронция на монтмориллоните
Uranium and strontium sorption on montmorillonite

Механизм	Соединение	Подземные воды, моль		
		Сульфатные	Карбонатные	Нитратные
Комплексообразование	$\equiv\text{AlOUO}_2^+$	$3,4 \cdot 10^{-8}$	$1,5 \cdot 10^{-8}$	$1,4 \cdot 10^{-8}$
	$\equiv\text{SiOUO}_2\text{OH}$	$9,9 \cdot 10^{-7}$	$7,9 \cdot 10^{-7}$	$9,7 \cdot 10^{-7}$
	$\equiv\text{AlOSr}^+$	$1,8 \cdot 10^{-15}$	$6,3 \cdot 10^{-14}$	$1,8 \cdot 10^{-14}$
Ионный обмен	SrX_2	$3,7 \cdot 10^{-5}$	$1,7 \cdot 10^{-5}$	$5,6 \cdot 10^{-6}$
	SrX^+	$7,5 \cdot 10^{-6}$	$5,7 \cdot 10^{-6}$	$1,0 \cdot 10^{-6}$
	SrNO_3X	-	-	$7,8 \cdot 10^{-7}$
	UO_2X_2	$3,1 \cdot 10^{-9}$	$2,0 \cdot 10^{-11}$	$1,2 \cdot 10^{-11}$

Таблица № 6

Формы нахождения элементов в зависимости от типа модельных подземных вод
Forms of occurrence of elements depending on the type of model groundwater

Элемент	Основные формы	Подземные воды, моль/л		
		Сульфатные	Карбонатные	Нитратные
Ca	CaHCO_3^+	$6,1 \cdot 10^{-6}$	$2,1 \cdot 10^{-4}$	$1,9 \cdot 10^{-5}$
	CaSO_4	$2,3 \cdot 10^{-4}$	$2,9 \cdot 10^{-4}$	$1,9 \cdot 10^{-4}$
	Ca^{2+}	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$6,4 \cdot 10^{-3}$	$6,9 \cdot 10^{-3}$
	CaNO_3^+	-	-	$7,1 \cdot 10^{-5}$
Mg	Mg^{2+}	$5,8 \cdot 10^{-4}$	$9,5 \cdot 10^{-4}$	$5,8 \cdot 10^{-4}$
	MgSO_4	$1,1 \cdot 10^{-5}$	$8,1 \cdot 10^{-5}$	$3,1 \cdot 10^{-5}$
	MgHCO_3^+	$1,9 \cdot 10^{-6}$	$3,2 \cdot 10^{-5}$	$1,7 \cdot 10^{-6}$
Na	NaSO_4^-	$4,2 \cdot 10^{-5}$	$2,4 \cdot 10^{-6}$	$2,9 \cdot 10^{-6}$
	NaHCO_3	$8,4 \cdot 10^{-6}$	$3,5 \cdot 10^{-6}$	$5,7 \cdot 10^{-7}$
	Na^+	$2,8 \cdot 10^{-3}$	$6,9 \cdot 10^{-4}$	$1,3 \cdot 10^{-3}$
U	$\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{2-}$	$2,9 \cdot 10^{-7}$	$9,8 \cdot 10^{-5}$	$3,8 \cdot 10^{-8}$
	$\text{UO}_2(\text{OH})_2$	$1,0 \cdot 10^{-7}$	$4,6 \cdot 10^{-8}$	$4,2 \cdot 10^{-8}$
	$\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3$	$2,6 \cdot 10^{-7}$	$1,4 \cdot 10^{-7}$	$9,0 \cdot 10^{-9}$
	$\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$	$2,0 \cdot 10^{-9}$	$1,7 \cdot 10^{-6}$	$1,3 \cdot 10^{-9}$
Sr	Sr^{2+}	$9,8 \cdot 10^{-6}$	$1,3 \cdot 10^{-5}$	$2,5 \cdot 10^{-6}$
	SrSO_4	$2,7 \cdot 10^{-6}$	$7,9 \cdot 10^{-7}$	$9,3 \cdot 10^{-8}$
	SrNO_3^+	-	-	$3,1 \cdot 10^{-8}$
	SrCO_3	$1,7 \cdot 10^{-9}$	$6,8 \cdot 10^{-9}$	$1,3 \cdot 10^{-10}$

В работе [54] указано, что основная сорбция стронция происходит по механизму ионного обмена, а кальций и магний являются основными конкурентами стронция за сорбционные центры, поэтому максимальная сорбция стронция обусловлена тем, что моделируемый раствор с преобладанием сульфатов содержит наименьшее количество

кальция и магния в исходном растворе, по сравнению с нитратным и карбонатным моделируемыми растворами. Таким образом, согласно результатам, представленным выше, расчетные значения коэффициентов распределения урана и стронция согласуются с экспериментальными.

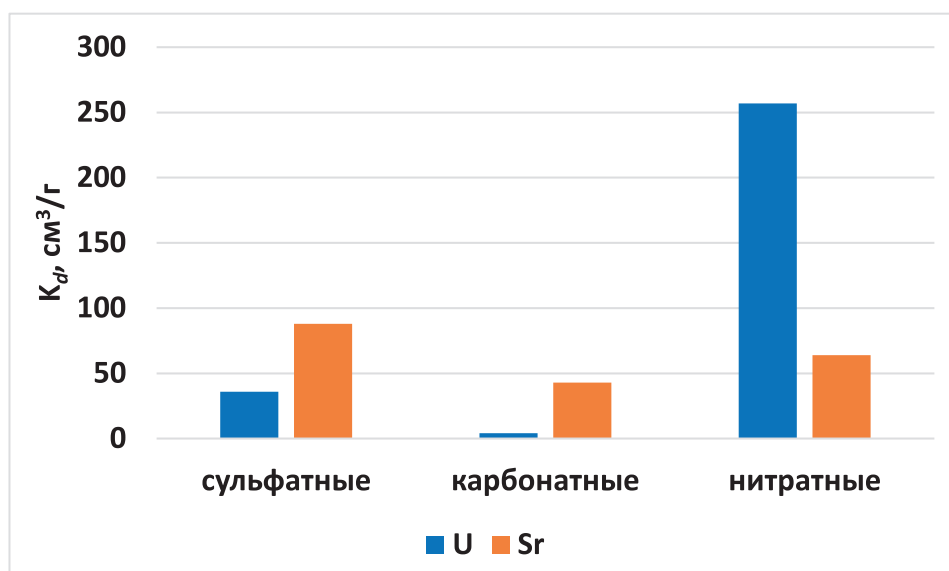


Рис. 8. Коэффициент распределения урана и стронция в различных по составу подземных водах после взаимодействия с бентонитом

[Fig. 8. Distribution coefficient of uranium and strontium in groundwater of different compositions after interaction with bentonite]

Заключение

Моделирование сорбции в стационарных условиях продемонстрировало значительное влияние содержания карбонатов на концентрацию урана. По данным расчетов, наиболее эффективная сорбция урана происходит при контакте бентонита с моделируемыми водами, в которых преобладают нитрат-ионы; наименее эффективная – с моделируемыми водами, содержащими значительное количество гидрокарбонатов. Сорбция главным образом зависит от количества устойчивых соединений карбонатов урана в равновесных растворах. Зависимость сорбции стронция от изменения анионного состава ниже, чем у урана. Моделирование показало, что на изменение K_d стронция преимущественно влияет конкурирующая сорбция с щелочноземельными металлами (кальцием, магнием).

При оценке сорбции в динамических условиях продемонстрировано влияние образования минеральных форм урана на его подвижность. Согласно расчетам, учет осаждения уранатов кальция на 30 % снижает подвижность урана в поровом растворе бетона, по сравнению с его поведением в поровом растворе бентонита. Без учета осаждения уранатов кальция подвижность урана в поровом растворе бетона значительно выше, чем в поровом растворе бентонита. Выбор сорбционной или сорбционно-осадительной модели миграции урана при расчетной оценке сорбционных свойств ИББ определяется

геохимическими условиями, которые сформировались в ПЗРО.

Полученные в настоящей статье результаты пока не являются однозначной основой для выбора того или иного материала ИББ для систем размещения и захоронения РАО, так как касаются только исследования их сорбционной способности расчетным методом для гипотетических модельных условий, однако они демонстрируют важность учета основных химических факторов при прогнозировании миграции радионуклидов из ПЗРО в окружающую среду. Следует уделять особое внимание параметрам и условиям, таким как состав раствора, формы нахождения химических элементов в растворе, а также фильтрационным свойствам материалов ИББ и их механической прочности.

Выбор состава и свойств материалов ИББ должен осуществляться по результатам экспериментальных и расчетных исследований. При этом геохимическое моделирование может быть использовано при экспериментальной оценке изолирующих свойств материалов ИББ в качестве инструмента для описания кинетики гидрогеохимических процессов.

Приведенные в настоящей статье подходы могут быть применены при развитии нормативной правовой базы в области использования атомной энергии в части методических подходов к геохимическому моделированию условий при расчетном обосновании долговременной безопасности ПХРО.

Литература

1. Федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии. Захоронение радиоактивных отходов. Принципы, критерии и основные требования (НП-055-14): утв. приказом Ростехнадзора от 22.08.2014 № 379 (в ред. от 18.05.2022).
2. Федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии. Приповерхностное захоронение радиоактивных отходов. Требования безопасности (НП-069-14): утв. приказом Ростехнадзора от 18.05.2017 № 163 (в ред. от 18.05.2022).
3. Руководство по безопасности при использовании атомной энергии. Рекомендации по обоснованию выбора и применению барьерных глинистых материалов в пунктах хранения радиоактивных отходов (РБ-042-24): утв. приказом Ростехнадзора от 20.02.2025 № 63.
4. Захоронение радиоактивных отходов. Конкретные требования безопасности № SSR-5. – МАГАТЭ, Вена, 2011.
5. Пункты геологического захоронения радиоактивных отходов. Специальное руководство по безопасности № SSG-14. – МАГАТЭ, Вена, 2023.
6. Safety assessment Methodologies for Near Surface Disposal Facilities. Results of a co-ordinated research project (IAEA-ISAM). IAEA, Vienna, 2004.
7. Руководство по безопасности при использовании атомной энергии. Оценка долговременной безопасности пунктов приповерхностного захоронения радиоактивных отходов (РБ-117-16): утв. приказом Ростехнадзора от 14.12.2016 № 531 (в ред. от 28.12.2017 № 589).
8. Soler J., Mader. U. (2005). Interaction between hyperalkaline fluids and rocks hosting repositories for radioactive waste: reactive transport simulations. *Nuclear Science and Engineering*, v. 151, No. 1, pp. 128–133.
9. Steefel C., Depaolo D. J., Lichtner P. (2005). Reactive transport modelling: an essential tool and a new approach for earth sciences. *Earth and Planetary Science Letters*, v. 240, pp. 539–548.
10. Kolakowski G., Blum P., Kulik D., Pfungsten W., Shao H., Singh A. (2009). Evolution of a generic clay/cement interface: First reactive transport calculations utilizing a Gibbs energy minimization based approach for geochemical calculations. *Journal of Environmental Science for Sustainable Society*, No. 3, pp. 41–49.
11. García-Gutiérrez M., Missana T., Mingarro M., Morejón J., Cormenzana J. (2018). Cesium diffusion in mortars from different cements used in radioactive waste repositories. *Applied Geochemistry*, v. 98, pp. 10–16.
12. Кузнецов Ю. В., Щебетковский В. Н., Трусов А. Г. Основы очистки воды от радиоактивных загрязнений. – М.: Атомиздат, 1974. – 360 с.
13. Егоров Ю. В., Бетенеков Н. Д., Пузако В. Д. Методы концентрирования и разделения радионуклидов. – Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2016. – 128 с.
14. Brady P., Kozak W. (1995). Geochemical engineering of low level radioactive waste in cementitious environments. *Waste Management*, v. 4, No. 15, pp. 293–301.
15. Арбузов С. И., Рихванов Л. П. Геохимия радиоактивных элементов. – Томск: Издательство Томского Политехнического Университета, 2010. – 300 с.
16. Гуськова В. Н. Уран. Радиационно-гигиеническая характеристика. – М.: Атомиздат, 1972. – 216 с.
17. Bachmaf S., Planer-Friedrich B., Merkel B. Competitive sorption and desorption of arsenate and uranium on bentonite and kaolinite. 19th annual V. M. Goldschmidt Conference (June 21–26, 2009). Davos, Switzerland, 2009, pp. 359–366.
18. Путилина В. С., Галицкая И. В., Юганова Т. И. Сорбционные процессы при загрязнении подземных вод тяжелыми металлами и радиоактивными элементами. Уран. – Новосибирск: ГПИТБ СО РАН, 2014. – 127 с.
19. Roehl K. E., Meggyes T., Simon F., Stewart D. (2005). Long-term performance of permeable reactive barriers. Elsevier, 244 p.
20. Boldyrev K. (2024). Aspects of modeling of the degradation of engineered safety barriers based on portland cement in radionuclide migration problems. *Radiochemistry*, v. 66, No. 2, pp. 253–267.
21. Chen Z. (2012). Geochemical modeling in environmental and geological studies. *Encyclopedia of Sustainability Science and Technology*. – New York: Springer, pp. 4094–4104.
22. Albarède F. (1995). Introduction to geochemical modeling. – London: Cambridge University Press, 563 p.

23. Борисов М. В., Шваров Ю. В. Термодинамика геохимических процессов. – М.: Издательство Московского университета, 1992. – 256 с.
24. Anderson G. (2017). *Thermodynamics of natural systems*. – London: Cambridge University Press, 648 p.
25. Puigdomenech I. (2014). Verification/validation of the codes PHREEQC, PHAST and TOUGHREACT. Complement to Technical Report TR-10-51 (Model Summary Report for the safety assessment SR-Site). – Stockholm: Svensk Kärnbränslehantering AB, 68 p.
26. Болдырев К. А. Моделирование коррозии углеродистой стали с учетом различных факторов в применении к прогнозированию срока службы контейнеров // Радиоактивные отходы. 2023. Т. 22. № 1. С. 45–57.
27. Болдырев К. А., Богатов С. А. Моделирование выхода радионуклидов из АФС-матрицы с учетом химических процессов // Радиоактивные отходы. 2024. Т. 29. № 4. С. 95–105.
28. Baqer Y., Thornton S., Stewart D., Norris S. Hui X. (2023). Analysis of uranium sorption in a laboratory column experiment using a reactive transport and surface complexation model. *Transport in Porous Media*, v. 149, pp. 423–452.
29. Tomita S., Igarashi G., Yamada K., Maruyama I. (2021). Modeling of the adsorption behavior of Cs and Sr on calcium silicate hydrates. *Journal of Advanced Concrete Technology*, v. 19, pp. 1061–1074.
30. Liang S.-Y., Lin W.-S., Chen C.-P., Liu C.-W., Fan C. (2021). A review of geochemical modeling for the performance assessment of radioactive waste disposal in a subsurface system. *Applied Sciences*, v. 11, No. 13, pp. 58–79.
31. Sellin P., Leupin O. (2013). The use of clay as an engineered barrier in radioactive-waste management – A review. *Clays and Clay Minerals*, v. 61, pp. 477–498.
32. Пронкин Н. С., Шарафутдинов Р. Б., Гераскин Н. И. Регулирование безопасности обращения с радиоактивными отходами. – М.: НИЯУ МИФИ, 2011. – 264 с.
33. Материалы обоснования лицензии на эксплуатацию пункта хранения радиоактивных отходов (стационарные объекты и сооружения, предназначенные для захоронения радиоактивных отходов) в г. Новоуральске Свердловской области (включая материалы оценки воздействия на окружающую среду) / Т. 2. – М.: ФГУП «НО РАО», 2020. – URL: <https://www.norao.ru/ecology/mol/novouralskoe-otdelenie-filiala-severskiy/> (дата обращения: 09.06.2025).
34. Материалы обоснования лицензии на сооружение приповерхностного пункта захоронения твердых радиоактивных отходов 3 и 4 классов, Челябинская область, Озерский городской округ (включая предварительные материалы оценки воздействия на окружающую среду) / Т. 1, 2. – М.: ФГУП «НО РАО», 2023. – URL: <https://www.norao.ru/ecology/mol/filial-ozerskiy> (дата обращения: 09.06.2025).
35. Материалы обоснования лицензии на размещение и сооружение приповерхностного пункта захоронения твердых радиоактивных отходов 3 и 4 классов, Томская область, городской округ ЗАТО Северск (включая материалы оценки воздействия на окружающую среду) / Т. 1. – М.: ФГУП «НО РАО», 2018. – URL: <https://www.norao.ru/ecology/mol/filial-severskiy/> (дата обращения: 09.06.2025).
36. Mašin D. (2018). *Modelling of bentonite for nuclear waste disposal facilities with hypoplasticity*. *Desiderata Geotechnica*. Springer series in geomechanics and geoengineering. Springer, Cham, pp. 93–98.
37. Chen J., Thomas J., Taylor H., Jennings H. (2004). Solubility and structure of calcium silicate hydrate. *Cement and Concrete Research Journal*, v. 34, pp. 1499–1519.
38. ГОСТ Р 51824-2001. Контейнеры защитные невозвратные для радиоактивных отходов из конструкционных материалов на основе бетона. Общие технические требования. – М.: Госстандарт России, 2001. – 8 с.
39. Pu Q., Jiang L., Xu J., Chu H., Xu Y., Zhang Y. (2012). Evolution of pH and chemical composition of pore solution in carbonated concrete. *Construction and Building Materials*, v. 28, No. 1, pp. 519–524.
40. Hart K. P., Lumpkin G. R. (2001). *Scientific basis for nuclear waste management XXIV*: v. 663, 1st ed. Cambridge University Press, 1247 p.
41. Tits J., Geipel G., Macé N., Eilzer M., Wieland E. (2011). Determination of uranium (VI) sorbed species in calcium silicate hydrate phases: A laser-induced luminescence spectroscopy and batch sorption study. *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 359, No. 1, pp. 248–256.
42. Androniuk J., Kalinichev A. (2020). Molecular dynamics simulation of the interaction of uranium (VI) with the C–S–H phase of cement in the presence of gluconate. *Applied Geochemistry*, v. 113, pp. 1–35.

43. Bachmaf S., Merkel D. (2010). Sorption of uranium (VI) at the clay mineral-water interface. *Environmental Earth Sciences*, v. 63, p. 925–934.
44. Kowal-Fouchard A., Drot R., Simoni E., Ehrhardt J. (2004). Use of spectroscopic techniques for uranium (VI). *Environmental Science & Technology*, v. 38, pp. 1399–1407.
45. Davis J., Kent D. (2018). Surface complexation modeling in aqueous geochemistry. *Mineral-Water Interface Geochemistry*, pp. 177–260.
46. Bachmaf S., Planer-Friedrich B., Merkel B. J. (2009). Effect of sulfate, carbonate, and phosphate on the uranium (VI) sorption behavior onto bentonite. *Radiochimica Acta*, v. 96, No. 6, pp. 359–366.
47. Трофимов В. Т., Королёв В. А., Вознесенский Е. А., Голодковская Г. А., Васильчук Ю. К., Зиангиров Р. С. *Грунтоведение*. – М: Издательство МГУ, 2005. – 1024 с.
48. Bonotto D., Wijesiri B., Goonetilleke A. (2019). Nitrate-dependent Uranium mobilisation in groundwater. *Science of The Total Environment*, v. 693, pp. 1–10.
49. Лепокурова О. Е., Иванова И. И., Шварцев С. Л., Колубаева Ю. В., Наливайко Н. Г. Химический и микробиологический состав подземных вод децентрализованного водоснабжения южных и центральных районов Томской области // *Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов*. 2016. Т. 327. № 5. С. 29–41.
50. Иешина А. В., Поленов И. К., Богачев М. А. *Ресурсы и геохимия подземных вод Карелии*. – Петрозаводск: Издательство КФАН СССР, 1987. – 149 с.
51. Bots P., Morris K., Hibberd R., Law G., Mosselmans J., Brown A., Douth J., Smith A., Shaw S. (2014). Formation of state uranium (VI) colloidal nanoparticles in conditions relevant to radioactive waste disposal. *Langmuir*, v. 30, pp. 14396–14405.
52. Davis J. (2001). *Surface Complexation Modeling of Uranium (VI) Adsorption on Natural Mineral Assemblages (NUREG/CR-6708)*. – Washington: U. S. Geological Survey.
53. Laudelout H., van Bladel R., Bolt G. H., Pag A. (1968). Thermodynamics of heterovalent cation. *Transactions of the Faraday Society*, v. 64, pp. 1477–1488.
54. Болдырев К. А., Капырин И. В., Константинова Л. И., Захарова Е. В. О моделировании сорбции стронция на породах в условиях высокой засоленности раствора нитратом натрия // *Радиохимия*. 2016. Т. 58. № 3. С. 211–217.

References

1. Federal'nye normy i pravila v oblasti ispol'zovaniya atomnoi ehnergii “Zakhroneniye radioaktivnykh otkhodov. Printsipy, kriterii i osnovnyye trebovaniya bezopasnosti” (NP-055-14) [Federal rules and regulations in the field of atomic energy use “Disposal of radioactive waste. Principles, criteria and basic safety requirements” (NP-055-14)], 2022.
2. Federal'nye normy i pravila v oblasti ispol'zovaniya atomnoi ehnergii “Pripoverkhnostnoe zakhronenie radioaktivnykh otkhodov. Trebovaniya bezopasnosti” (NP-069-14) [Federal rules and regulations in the field of atomic energy use “Near-surface disposal of radioactive waste. Safety requirements” (NP-069-14)]. 2022.
3. Rukovodstvo po bezopasnosti pri ispol'zovanii atomnoi ehnergii “Rekomendatsii po obosnovaniyu vybora i primeneniyu bar'ernykh glinistych materialov v punktakh pripoverkhnostnogo zakhroneniya radioaktivnykh otkhodov” (RB-042-24) [Safety guide for the use of nuclear energy “Recommendations for the justification of the selection and use of barrier clay materials in radioactive waste storage facilities” (RB-042-24)]. 2025.
4. Disposal of radioactive waste. IAEA Safety Standards Series No. SSR-5. IAEA, Vienna, 2011.
5. Geological Disposal Facilities for Radioactive Waste. Specific Safety Guide № SSG-14. IAEA, Vienna, 2011.
6. Safety Assessment Methodologies for Near Surface Disposal Facilities. Results of a co-ordinated research project (IAEA-ISAM). IAEA, Vienna, 2004.
7. Rukovodstvo po bezopasnosti pri ispol'zovanii atomnoy ehnergii “Otsenka dolgovremennoy bezopasnosti punktov pripoverkhnostnogo zakhroneniya radioaktivnykh otkhodov” (RB-117-16) [Safety guide for the use of nuclear energy “Long-term safety assessment of near-surface repositories for radioactive waste” (RB-117-16)]. 2017.
8. Soler J., Mader. U. (2005). Interaction between hyperalkaline fluids and rocks hosting repositories for radioactive waste: reactive transport simulations. *Nuclear Science and Engineering*, v. 151, No. 1, pp. 128–133.

9. Steefel C., Depaolo D. J., Lichtner P. (2005). Reactive transport modelling: an essential tool and a new approach for earth sciences. *Earth and Planetary Science Letters*, v. 240, pp. 539–548.
10. Kolakowski G., Blum P., Kulik D., Pfingsten W., Shao H., Singh A. (2009). Evolution of a generic clay/cement interface: First reactive transport calculations utilizing a Gibbs energy minimization based approach for geochemical calculations. *Journal of Environmental Science for Sustainable Society*, No. 3, pp. 41–49.
11. García-Gutiérrez M., Missana T., Mingarro M., Morejón J., Cormenzana J. (2018). Cesium diffusion in mortars from different cements used in radioactive waste repositories. *Applied Geochemistry*, v. 98, pp. 10–16.
12. Kuznetsov Yu. V., Schebetkovsky V. N., Trusov A. G. (1974). *Osnovy ochistki vody ot radioaktivnykh zagryaznenii* [Fundamentals of water purification from radioactive contamination]. Moscow: Atomizdat, 360 p. [in Russian].
13. Egorov Yu. V., Betenkov N. D., Puzako V. D. (2016). *Metody koncentrirovaniya i razdeleniya radionuklidov* [Methods of concentration and separation of radionuclides]. Ekaterinburg: Izdatel'stvo Ural'skogo universiteta, 128 p. [in Russian].
14. Brady P., Kozak W. (1995). Geochemical engineering of low level radioactive waste in cementitious environments. *Waste Management*, v. 4, No. 15, pp. 293–301.
15. Arbuzov S. I., Richvanov L. P. (2010). *Geokhimiya radioaktivnykh elementov* [Geochemistry of radioactive elements]. Tomsk: Izdatel'stvo Tomskogo politehnicheskogo universiteta, 300 p. [in Russian].
16. Gus'kova V. N. (1972). *Uran. Radiatsionno-gigienicheskaya charakteristika* [Uranium. Radiation and hygienic characteristics]. Moscow: Atomizdat, 216 p. [in Russian].
17. Bachmaf S., Planer-Friedrich B., Merkel B. Competitive sorption and desorption of arsenate and uranium on bentonite and kaolinite: 19th annual V. M. Goldschmidt Conference (June 21–26, 2009). Davos, Switzerland, 2009, pp. 359–366.
18. Putilina V. S., Galitskaya I. V., Uganova T. I. (2014). *Sorbtsionnye processy pri zagryaznenii podzemnykh vod tyazhelymi metallami i radioaktivnymi elementami. Uran* [Sorption processes during groundwater pollution with heavy metals and radioactive elements. Uranium]. – Novosibirsk: GPNTB SO RAS, 127 p. [in Russian].
19. Roehl K. E., Meggyes T., Simon F., Stewart D. (2005). Long-term performance of permeable reactive barriers. Elsevier, 244 p.
20. Boldyrev K. A. (2024). Aspects of modeling of the degradation of engineered safety barriers based on portland cement in radionuclide migration problems. *Radiochemistry*, v. 66, No. 2, pp. 253–267.
21. Chen Z. (2012). Geochemical modeling in environmental and geological studies. *Encyclopedia of Sustainability Science and Technology*. – New York: Springer, pp. 4094–4104.
22. Albarède F. (1995). *Introduction to geochemical modeling*. – London: Cambridge University Press, 563 p.
23. Borisov M. V., Shvarov U. V. (1992). *Termodinamika geokhimicheskikh protsessov* [Thermodynamics of geochemical processes]. Moscow: Izdatel'stvo Moskovskogo universiteta, 256 p. [in Russian].
24. Anderson G. (2017). *Thermodynamics of natural systems*. – London: Cambridge University Press, 648 p.
25. Puigdomenech I. (2014). Verification/validation of the codes PHREEQC, PHAST and TOUGHREACT. Complement to Technical Report TR-10-51 (Model Summary Report for the safety assessment SR-Site). Stockholm: Svensk Kärnbränslehantering AB, 68 p.
26. Boldyrev K. A. (2023). Modelirovaniye korrozii uglerodistoy stali s uchetom razlichnykh faktorov v primeneniye k prognozirovaniyu sroka sluzhby konteynerov [Modeling of carbon steel corrosion considering various factors applied to container service life prediction]. *Radioaktivnyye otkhody – Radioactive waste*, v. 22, No. 1, pp. 45–57. [in Russian].
27. Boldyrev K. A., Bogatov S. A. (2024). Modelirovaniye vykhoda radionuklidov iz AFS-matritsy s uchetom khimicheskikh protsessov [Modeling the release of radionuclides from the AFS matrix taking into account chemical processes]. *Radioaktivnyye otkhody – Radioactive waste*, v. 29, No. 4, pp. 95–105. [in Russian].
28. Baqer Y., Thornton S., Stewart D., Norris S. Hui X. (2023). Analysis of uranium sorption in a laboratory column experiment using a reactive transport and surface complexation model. *Transport in Porous Media*, v. 149, pp. 423–452.
29. Tomita S., Igarashi G., Yamada K., Maruyama I. (2021). Modeling of the adsorption behavior of Cs and Sr on calcium silicate hydrates. *Journal of Advanced Concrete Technology*, v. 19, pp. 1061–1074.

30. Liang S.-Y., Lin W.-S., Chen C.-P., Liu C.-W., Fan C. (2021). A review of geochemical modeling for the performance assessment of radioactive waste disposal in a subsurface system. *Applied Sciences*, v. 11, No. 13, pp. 58–79.
31. Sellin P., Leupin O. (2013). The use of clay as an engineered barrier in radioactive-waste management – A review. *Clays and Clay Minerals*, v. 61, pp. 477–498.
32. Pronkin N. S., Sharafutdinov R. B., Geraskin N. I. (2011). *Regulirovaniye bezopasnosti obrashcheniya s radioaktivnymi otkhodami* [Regulation of safety of radioactive waste management]. Moscow: NIYAU MIFI, 264 p. [in Russian].
33. *Materialy obosnovaniya litsenzii na ekspluatatsiyu punkta khraneniya radioaktivnykh otkhodov (statsionarnyye ob'yekty i sooruzheniya, prednaznachennyye dlya zakhroneniya radioaktivnykh otkhodov) v g. Novoural'ske Sverdlovskoy oblasti (vklyuchaya materialy otsenki vozdeystviya na okruzhayushchuyu sredu)* [Materials for substantiating a license for the operation of a radioactive waste storage facility in Novouralsk, Sverdlovsk Region. Vol. 2]. Moscow: FGUP “NO RAO”, 2020. – URL: <https://www.norao.ru/ecology/mol/novouralskoe-otdelenie-filiala-severskiy> (reference date: 09.06.2025).
34. *Materialy obosnovaniya litsenzii na sooruzheniye pripoverkhnostnogo punkta zakhroneniya tverdykh radioaktivnykh otkhodov 3 i 4 klassov, Chelyabinskaya oblast', Ozerskiy gorodskoy okrug (vklyuchaya predvaritel'nyye materialy otsenki vozdeystviya na okruzhayushchuyu sredu)* [Materials for substantiating a license for the construction of a near-surface disposal site for solid radioactive waste of classes 3 and 4, Chelyabinsk Region, Ozersky Urban District. Vol. 1, 2]. Moscow: FGUP “NO RAO”, 2023. – URL: <https://www.norao.ru/ecology/mol/filial-ozerskiy> (reference date: 09.06.2025).
35. *Materialy obosnovaniya litsenzii na razmeshcheniye i sooruzheniye pripoverkhnostnogo punkta zakhroneniya tverdykh radioaktivnykh otkhodov 3 i 4 klassov, Tomskaya oblast', gorodskoy okrug ZATO Seversk (vklyuchaya materialy otsenki vozdeystviya na okruzhayushchuyu sredu)* [Materials for substantiating a license for the placement and construction of a near-surface disposal site for solid radioactive waste of classes 3 and 4, Tomsk Region, urban district of ZATO Seversk. Vol. 1]. Moscow: FGUP “NO RAO”, 2018. – URL: <https://www.norao.ru/ecology/mol/filial-severskiy/> (reference date: 09.06.2025).
36. Mašin D. (2018). Modelling of bentonite for nuclear waste disposal facilities with hypoplasticity. *Desiderata Geotechnica*. Springer series in geomechanics and geoengineering. Springer, Cham, pp. 93–98.
37. Chen J., Thomas J., Taylor H., Jennings H. (2004). Solubility and structure of calcium silicate hydrate. *Cement and Concrete Research Journal*, v. 34, pp. 1499–1519.
38. GOST R 51824-2001. *Konteynery zashchitnyye nevozvratnyye dlya radioaktivnykh otkhodov iz konstruktsionnykh materialov na osnove betona. Obshchiye tekhnicheskiye trebovaniya* [GOST R 51824-2001. Non-retrievable shielding casks for radioactive waste made of concrete based structural materials. General technical requirements]. 2001.
39. Pu Q., Jiang L., Xu J., Chu H., Xu Y., Zhang Y. (2012). Evolution of pH and chemical composition of pore solution in carbonated concrete. *Construction and Building Materials*, v. 28, No. 1, pp. 519–524.
40. Hart K. P., Lumpkin G. R. (2001). *Scientific basis for nuclear waste management XXIV*: v. 663, 1st ed. Cambridge University Press, 1247 p.
41. Tits J., Geipel G., Macé N., Eilzer M., Wieland E. (2011). Determination of uranium (VI) sorbed species in calcium silicate hydrate phases: A laser-induced luminescence spectroscopy and batch sorption study. *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 359, No. 1, pp. 248–256.
42. Androniuk J., Kalinichev A. (2020). Molecular dynamics simulation of the interaction of uranium (VI) with the C–S–H phase of cement in the presence of gluconate. *Applied Geochemistry*, v. 113, pp. 1–35.
43. Bachmaf S., Merkel D. (2010). Sorption of uranium (VI) at the clay mineral-water interface. *Environmental Earth Sciences*, v. 63, pp. 925–934.
44. Kowal-Fouchard A., Drot R., Simoni E., Ehrhardt J. (2004). Use of spectroscopic techniques for uranium (VI). *Environmental Science & Technology*, v. 38, pp. 1399–1407.
45. Davis J., Kent D. (2018). Surface complexation modeling in aqueous geochemistry. *Mineral-Water Interface Geochemistry*, pp. 177–260.
46. Bachmaf S., Planer-Friedrich B., Merkel B. J. (2009). Effect of sulfate, carbonate, and phosphate on the uranium (VI) sorption behavior onto bentonite. *Radiochimica Acta*, v. 96, No. 6, pp. 359–366.

47. Trofimov V. T., Korolov V. A., Voznesenskiy Ye. A., Golodkovskaya G. A., Vasil'chuk Yu. K., Ziangirov R. S. (2005). Gruntovedeniye [Soil Engineering]. Moscow: Izdatel'stvo MGU, 1024 p. [in Russian].

48. Bonotto D., Wijesiri B., Goonetilleke A. (2019). Nitrate-dependent Uranium mobilisation in groundwater. *Science of the Total Environment*, v. 693, pp. 1–10.

49. Lepokurova O. Ye., Ivanova I. I., Shvartsev S. L., Kolubayeva Yu. V., Nalivayko N. G. (2016). Khimicheskiy i mikrobiologicheskiy sostav podzemnykh vod detsentralizovannogo vodosnabzheniya yuzhnykh i tsentral'nykh rayonov Tomskoy oblasti [Chemical and microbiological composition of groundwater of decentralized water supply of the southern and central regions of Tomsk region]. *Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta. Inzhiniring georesursov – Bulletin of Tomsk Polytechnic University. Engineering of georesources*, v. 327, No. 5, pp. 29–41. [in Russian].

50. Iyeshina A. V., Polenov I. K., Bogachev M. A. (1987). Resursy i geokhimiya podzemnykh vod Karelii [Resources and geochemistry of groundwater in Karelia]. Petrozavodsk: Izdatel'stvo KFAN SSSR, 1987. – 149 p. [in Russian].

51. Bots P., Morris K., Hibberd R., Law G., Mosselmans J., Brown A., Douth J., Smith A., Shaw S. (2014). Formation of state uranium (VI) colloidal nanoparticles in conditions relevant to radioactive waste disposal. *Langmuir*, v. 30, pp. 14396–14405.

52. Davis J. (2001). Surfa Complexation Modeling of Uranium (VI) Adsorption on Natural Mineral Assemblages (NUREG/CR-6708). – Washington: U. S. Geological Survey.

53. Laudelout H., van Bladel R., Bolt G. H., Pag A. (1968). Thermodynamics of heterovalent cation. *Transactions of the Faraday Society*, v. 64, pp. 1477–1488.

54. Boldyrev K. A., Kapyrin I. V., Konstantinova L. I., Zakharova Ye. V. (2016). O modelirovanii sorbtсии strontsiya na porodakh v usloviyakh vysokoy zasolennosti rastvora nitratom natriya [On modeling strontium sorption on rocks under conditions of high salinity of the solution with sodium nitrate]. *Radiokhimiya – Radiochemistry*, v. 58, No. 3, pp. 211–217. [in Russian].

Сведения об авторах

Баранов Дмитрий Юрьевич, научный сотрудник отдела безопасности предприятий топливного цикла, федеральное бюджетное учреждение «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности» (107140, Москва, вн. тер. г. муниципальный округ Красносельский, ул. Малая Красносельская, д. 2/8, корп. 5).

Мурлис Денис Витальевич, начальник лаборатории отдела безопасности предприятий топливного цикла, федеральное бюджетное учреждение «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности» (107140, Москва, вн. тер. г. муниципальный округ Красносельский, ул. Малая Красносельская, д. 2/8, корп. 5).

Понизов Антон Владимирович, заместитель директора, федеральное бюджетное учреждение «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности» (107140, Москва, вн. тер. г. муниципальный округ Красносельский, ул. Малая Красносельская, д. 2/8, корп. 5).

Верецагин Павел Михайлович, заместитель начальника отдела безопасности предприятий топливного цикла, федеральное бюджетное учреждение «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности» (107140, Москва, вн. тер. г. муниципальный округ Красносельский, ул. Малая Красносельская, д. 2/8, корп. 5).

Муслимов Денис Дмитриевич, научный сотрудник отдела безопасности предприятий топливного цикла, федеральное бюджетное учреждение «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности» (107140, Москва, вн. тер. г. муниципальный округ Красносельский, ул. Малая Красносельская, д. 2/8, корп. 5).

Authors credentials

Baranov Dmitriy Yurievich, Researcher of Division for Safety of Fuel Cycle Facilities, Scientific and Engineering Centre for Nuclear and Radiation Safety (2/8 bld. 5, Malaya Krasnoselskaya str., vn. ter. g. municipalnyi okrug Krasnoselskii, Moscow, 107140), e-mail: baranov@secnrs.ru.

Murlis Denis Vital'evich, Head of laboratory of Division for Safety of Fuel Cycle Facilities, Scientific and Engineering Centre for Nuclear and Radiation Safety (2/8 bld. 5, Malaya Krasnoselskaya str., vn. ter. g. municipalnyi okrug Krasnoselskii, Moscow, 107140), e-mail: murlis@secnrs.ru.

Ponizov Anton Vladimirovich, Deputy Director, Scientific and Engineering Centre for Nuclear and Radiation Safety (2/8 bld. 5, Malaya Krasnoselskaya str., vn. ter. g. municipalnyi okrug Krasnoselskii, Moscow, 107140), e-mail: ponizov@secnrs.ru.

Vereshchagin Pavel Mikhailovich, Deputy Head of Division for Safety of Fuel Cycle Facilities, Scientific and Engineering Centre for Nuclear and Radiation Safety (2/8 bld. 5, Malaya Krasnoselskaya str., vn. ter. g. municipalnyi okrug Krasnoselskii, Moscow, 107140), e-mail: vereschagin@secnrs.ru.

Muslimov Denis Dmitrievich, Researcher of Division for Safety of Fuel Cycle Facilities, Scientific and Engineering Centre for Nuclear and Radiation Safety (2/8 bld. 5, Malaya Krasnoselskaya str., vn. ter. g. municipalnyi okrug Krasnoselskii, Moscow, 107140), e-mail: muslimov@secnrs.ru.

Для цитирования

Баранов Д. Ю., Мурлис Д. В., Понизов А. В., Верещагин П. М., Муслимов Д. Д. Применение геохимического моделирования для расчетной оценки сорбционных свойств инженерных барьеров безопасности пунктов хранения радиоактивных отходов // Ядерная и радиационная безопасность. 2025. № 2 (116). С. 18–38. DOI: 10.26277/SECNRS.2025.116.2.002.

For citation

Baranov D. Yu., Murlis D. V., Ponizov A. V., Vereshchagin P. M., Muslimov D. D. Primenenie geokhimicheskogo modelirovaniya dlya raschetnoi otsenki sorbcionnykh svojstv inzhenernykh bar'erov bezopasnosti punktov khraneniya radioaktivnykh otkhodov [Application of geochemical modeling for derived estimate of sorption properties of engineering safety barriers of radioactive waste storage facilities]. Yadernaya i radiatsionnaya bezopasnost' – Nuclear and Radiation Safety Journal, No. 2 (116), pp. 18–38. [in Russian]. DOI: 10.26277/SECNRS.2025.116.2.002.

