**Поиск и исследование матриц для иммобилизации циркония из радиоактивных отходов**

***Рубцов И.Д.***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*Факультет наук о материалах, Москва, Россия*

*E-mail: rubtsov.ivan3791@gmail.com*

За последние полвека проблема утилизации радиоактивных отходов приобрела большую актуальность. Существующие подходы к их захоронению основаны на принципах использования нескольких барьеров для надежной защиты. Один из этих барьеров — иммобилизация отработанных радионуклидов в специальных матрицах. Однако, цирконий, широко применяемый в производстве тепловыделяющих элементов и топливных каналов, создает сложности в утилизации отходов. Перспективными материалами для иммобилизации циркония являются оксидные керамические матрицы. В соответствии с нормативными требованиями, основными характеристиками таких матриц являются механическая прочность, устойчивость к воздействию воды, радиационная и термическая стойкость. Применение методов машинного обучения может существенно облегчить процесс поиска подходящих материалов для последующего использования в качестве матриц для иммобилизации радиоактивного циркония.

Таким образом, целью данной работы является поиск перспективных оксидных матриц для иммобилизации циркония с помощью методов машинного обучения.

Для достижения поставленной цели были разработаны и обучены модели для предсказания энергии образования, температуры плавления, модуля сжатия и сдвига на основе архитектуры CrabNet[1]. Модели способны с высокой точностью предсказывать механические свойства, энергию образования[R2=0.93] и температуру плавления[R2=0.91].

С использованием полученных моделей был проведен скрининг по экспериментальным базам данных с полученными ранее соединениями, содержащими цирконий. Результаты расчетов для лучших по механическим свойствам составам представлен в таблице 1.

Табл. 1. Перспективные материалы для использования в качестве матриц для иммобилизации циркония.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Состав | KVRH, ГПа | GVRH , ГПа | Eform, эВ/атом | Tmelt, К |
| ZrMnNiO4 | 169 | 133 | –2.5 | 1785 |
| Zr0.33Ti0.67O2 | 163 | 58 | –3.4 | 1769 |
| Sr0.4 ZrPb0.6O3 | 141 | 66 | –3.1 | 1647 |
| ZrV0.043Ge0.957O4 | 153 | 60 | –2.7 | 1627 |
| Ca0.99Zr1.3Ti1.7O7 | 147 | 62 | –3.6 | 1686 |

Дальнейшая работа по теме предполагает синтез и исследование предложенных соединений.

**Литература**

[1] A. Y.-T. Wang, S. K. Kauwe, R. J. Murdock, T. D. Sparks, Compositionally restricted attention-based network for materials property predictions, npj Comput. Mater., 2021, 7: 77. DOI: 10.1038/s41524-021-00545-1