

ДОСЛІДЖЕННЯ ЕФЕКТІВ ГІДРАТАЦІЇ ТА ГІДРОЛІЗУ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ УРАНІЛУ

М. Ю. Дручок, М. Ф. Головко, Т. М. Брик

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів

Запропоновано модель водного розчину уранілу. У рамках цієї моделі проведено моделювання методом молекулярної динаміки й досліджено структурні та динамічні властивості уранілу та його гідратної оболонки. Використання нежорсткої моделі центральних сил для опису води дало змогу описати гідроліз води під впливом іонів уранілу та врахувати ефекти перерозподілу заряду на продуктах гідролізу.

Вступ

Упродовж останніх десятиліть проблема потрапляння радіоактивних відходів у водойми надала поштовху до розвитку багатьох теоретичних та експериментальних досліджень. Розуміння процесів комплексоутворення в подібних системах може дати важливу інформацію для хімічної технології, медицини і екології довкілля. Актиніди An (уран, плутоній, нептуній тощо) у водних розчинах легко утворюють відповідні двоокиси $(AnO_2)^{Z+}$ - актиніли. Довжина обох зв'язків An=O коливається в межах 1,7 - 1,8 Å, а кут O=An=O є близьким до 180°. Як правило, у гідратній оболонці актинілу знаходиться п'ять молекул води, так званих ліганд, що розміщені на відстанях 2,5 - 2,6 Å від актиніду в екваторіальній площині, яка проходить через актинід і є перпендикулярною до осі O=An=O. Одним із шляхів дослідження структури гідратної оболонки є квантово-хімічні розрахунки по мінімізації енергії гідратації. У роботах [1, 2] показано, що кількість ліганд уранілу, нептунілу та плутонілу є рівною 5, а розраховані відстані R_{An-Oe} і R_{An-Oa} (e - екваторіальні, a - аксіальні іони кисню) добре узгоджуються з експериментальними даними [3, 4]. Інший аспект такого підходу пов'язаний з оцінкою констант рівноваги для гідролізу, солюбілізації тощо [5 - 7]. Було показано, що втрата одного протона з гідратної оболонки уранілу є енергетично вигідною. На жаль, у розчині складно коректно означити негідратований актиніл: $R_{An-Oe} \rightarrow \infty$ означає створення пустоти у гідратній оболонці, яка відразу буде заповнена іншою молекулою з об'єму. *Ab initio* розрахунки, виконані в [8], показали, що гідратна оболонка уранілу містить п'ять ліганд, можливе утворення гідроксогруп, крім того, відбувається перерозподіл зарядів між іонами уранілу та ліганд. Такі дослідження структурних властивостей (зокрема, інформація про ефективні заряди й міжатомні відстані) є корисними для побудови моделей для класичного моделювання. У роботах [9 - 11] моделювання методом молекулярної динаміки (МД) проведено для водних розчинів актинідів із використанням моделей TIP3P чи SPC для опису води. Проте такий підхід не описує ні деформацію, ні гідроліз молекул води, оскільки вищезгадані моделі є жорсткими. У даній роботі ми вивчатимемо гідратацію уранілу за допомогою нежорсткої моделі води центральних сил (ЦС) [12]. Для кращого опису продуктів гідролізу нами враховано перерозподіл заряду на OH^- і H^+ після дисоціації молекул у гідратній оболонці уранілу, подібно до того, як нами було запропоновано в [13, 14].

Модель

Дані дослідження гідратації уранілу проведено за допомогою змішаної моделі. Молекули води представлено в рамках моделі ЦС. Ця модель представляє воду як суміш іонів кисню та водню з певними ефективними зарядами та парними міжчастинковими взаємодіями. Для опису взаємодії уранілу з водою запозичено потенціали з [11], що мають такий вигляд:

$$E_{ij} = \frac{Z_i Z_j}{r} + \frac{A_i A_j}{r^{12}} - \frac{B_i B_j}{r^6} \quad 1)$$

Для зручності кисень в уранілі будемо позначати O^* . Параметри взаємодії (1) зібрано у табл. 1. Для відтворення внутрішньомолекулярної геометрії було жорстко зафіксовано довжину зв'язку $U-O^*$, щоб вона становила $1,75 \text{ \AA}$, і накладено додаткову умову на валентний кут O^*-U-O^* у вигляді $E_{O^*-U-O^*} \sim (\Theta - 180^\circ)^2$.

Таблиця 1. Параметри міжчастинкової взаємодії для іонів кисню O , водню H , урану U та кисню в уранілі O^*

Іон	Z	$A, (\text{ккал} \cdot \text{\AA}^{12}/\text{моль})^{1/2}$	$B, (\text{ккал} \cdot \text{\AA}^6/\text{моль})^{1/2}$
O	-0,65966	793,322	25,010
H	0,32983	0,1	0,0
U	2,500	629,730	27,741
O^*	-0,250	793,322	25,010

Оскільки вода описана моделлю ЦС, заряди на іонах кисню та водню є ефективними (див. табл. 1), проте у випадку дисоціації ефективні заряди повинні бути наступними: для вільного протона $Z_H = +1$, групи OH^- $Z_{OH} = -1$. Щоб уникнути цієї неузгодженості, ми вважаємо, що Z_H є функцією від відстані r_{OH} між протоном і киснем “рідної” молекули води. Нами було запропоновано цю залежність у формі

$$Z_H = Z_{ЦС} + \frac{1 + th[(r_{OH} - r_0)/\delta]}{2} (1 - Z_{ЦС}), \quad (2)$$

де r_0 визначає позицію ділянки, на якій відбувається перерозподіл заряду (відносно r_{OH} - відстані зв'язку $O-H$), δ є шириною цієї ділянки. $Z_{ЦС}$ є зарядом іона водню в рамках моделі ЦС і є рівним 0,32983, r_0 і δ дорівнюють 2,5 і 0,4 \AA відповідно. Заряд кисню узгоджено також міняється як

$$Z_O = Z_{H1} + Z_{H2}. \quad (3)$$

Протони та іони кисню з перерозподіленими зарядами під час симуляції виникають за умови, якщо відстань r_{OH} перевищує 1,1 \AA (рівноважне значення для цієї відстані 0,97 - 0,98 \AA).

Результати

Моделювання МД виконано з використанням стандартного пакета DL_POLY. У системі перебувало 1727 молекул води та один іон уранілу. Застосовано періодичні XYZ граничні умови для МД-комірки зі співвідношенням сторін $L_x:L_y:L_z=1:1:1,375$. Для моделювання виконано 10^5 кроків з часовим кроком $2 \cdot 10^{-16}$ с. Нормальні умови (температура 298 К та тиск 1 атм) контролювалися за допомогою баро- і термостата Нозе - Гувера в ізотропному NPT ансамблі. Відстань обрізання короткосяжних взаємодій становила 10 \AA . Кулонівські взаємодії розраховувалися за допомогою техніки сумування Евальда.

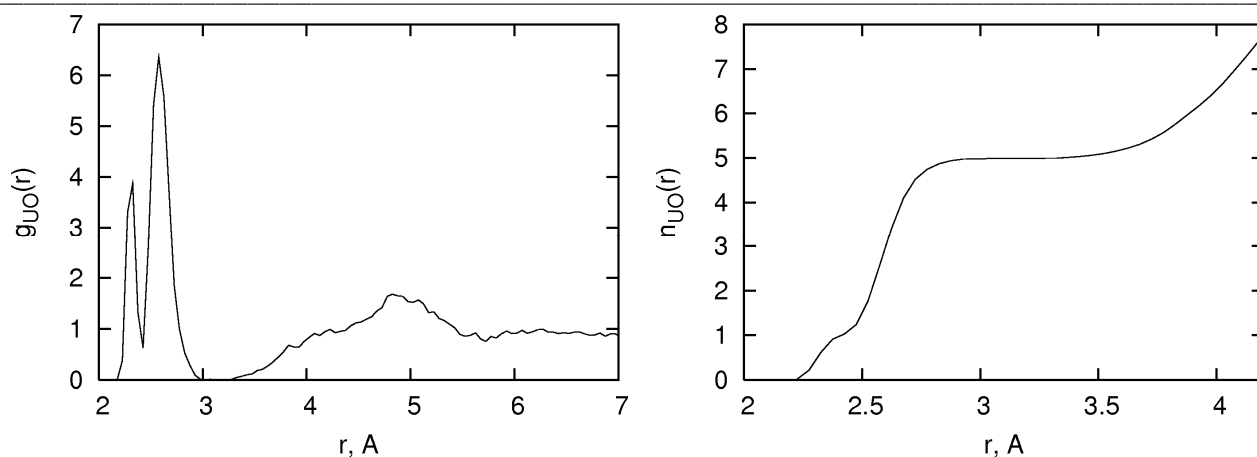
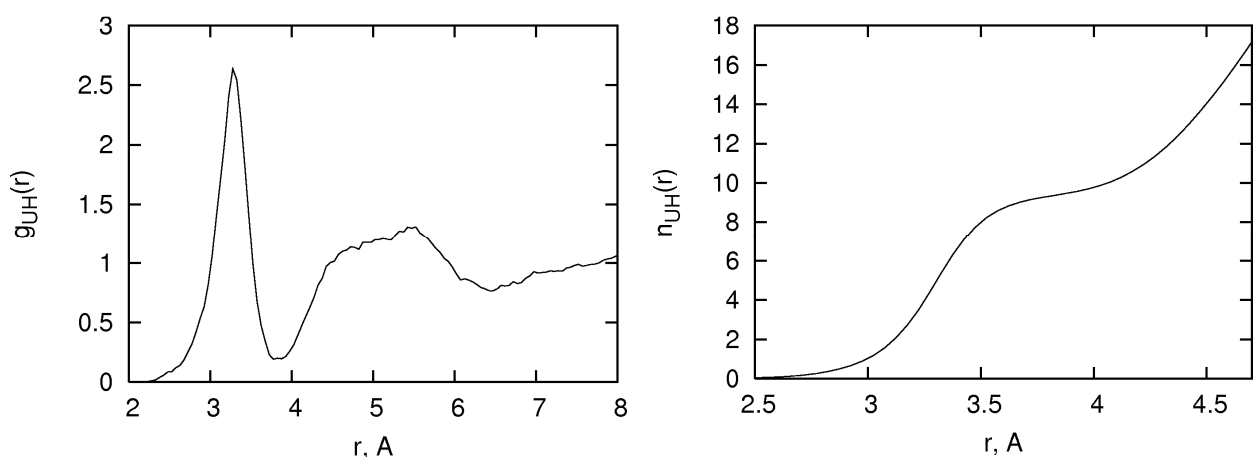
Дослідження гідратної структури уранілу зручно провести на мові радіальних функцій розподілу $g_{UO}(r)$, $g_{UH}(r)$ і відповідних біжучих координаційних чисел $n_{UO}(r)$, $n_{UH}(r)$.

$$n_{U\alpha}(r) = 4\pi\rho_\alpha \int_0^r x^2 g_{U\alpha}(x) dx \quad (4)$$

Ці радіальні функції розподілу та біжучі координаційні числа представлено на рис. 1 і 2.

З рис. 1 легко бачити, що перший пік функції $g_{UO}(r)$ розділений на два піки на відстанях 2,28 і 2,58 \AA , а в області 3,18 \AA функція g_{UO} спадає до нуля. У зв'язку з цим, функція $n_{UO}(r)$ має на відповідних відстанях плече й плато на значеннях 1 і 5. Це говорить про те, що перша гідратна оболонка уранілу відділена від об'ємної фази й містить п'ять сусідів, один з яких міститься на відстані 2,28 \AA , а решта – на відстані 2,58 \AA .

На рис. 2 наведено радіальну функцію розподілу $g_{UH}(r)$ й біжучі координаційні числа $n_{UH}(r)$. Розподіл $U-H$ демонструє виразний пік на відстані 3,28 \AA і мінімум на 3,71 \AA . Порів-

Рис. 1. Радіальна функція розподілу $g_{UO}(r)$ та відповідні біжучі координаційні числа $n_{UO}(r)$.Рис. 2. Радіальна функція розподілу $g_{UH}(r)$ та відповідні біжучі координаційні числа $n_{UH}(r)$.

нюючи позиції перших піків функцій $g_{UO}(r)$ і $g_{UH}(r)$, можна зробити висновок, що молекули води в гідратній оболонці уранілу орієнтовані іонами водню назовні від уранілу. Інтегрування по першому пікові функції $g_{UH}(r)$ дає кількість найближчих сусідів, рівною 9. Це свідчить про те, що перша гідратна оболонка містить чотири молекули H_2O і одну OH^- групу. Очевидно, відштовхування між гідролізованим протоном і ураном перевищує утримування його в молекулі води й він переходить в об'ємну фазу. Ми трактуємо це явище як катіонний гідроліз. Після такого короткого аналізу легко пояснити походження двох піків на функції $g_{UO}(r)$. Під час гідролізу утворюються нові іони OH^- і H^+ , відстань між ними зростає, і коли протон покидає гідратну оболонку уранілу, заряди на іонах поступово зростають до значень -1 і $+1$ відповідно. Це приводить до диференціації іона кисню групи OH^- від іонів кисню молекул води, описаних у рамках чистої моделі ЦС. Зростання заряду на іоні кисню веде до посилення притягання між ураном і киснем і, як наслідок, група OH^- зміщується на відстані, ближчі до урану, ніж інші чотири негідролізовані молекули води. У табл. 2 наведено деякі найважливіші деталі радіальних функцій розподілу і біжучих координаційних чисел. Дві лінійки для розподілу U-O відповідають двом пікам функції $g_{UO}(r)$.

Для кращої ілюстрації результатів на рис. 3 наведено миттєву конфігурацію уранілу та його гідратної оболонки. Усі ліганди розміщені в площині, екваторіальній до осі уранілу

Таблиця 2. Структурні властивості першої гідратної оболонки уранілу

Розподіл	$r_{max1}, \text{Å}$	$g(r_{max1})$	$r_{min1}, \text{Å}$	$n(r_{min1})$
U-O	2,28	3,30	2,41	1,00
	2,58	6,37	3,18	5,00
U-H	3,28	2,64	3,71	9,13

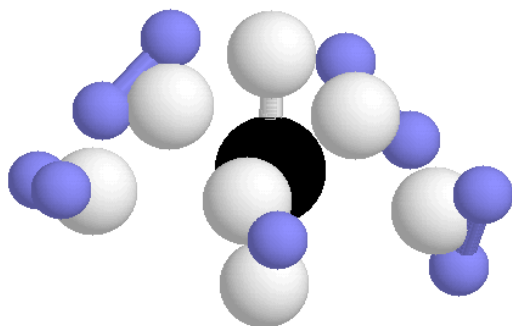


Рис. 3. Миттєва конфігурація уранілу та його гідратної оболонки.

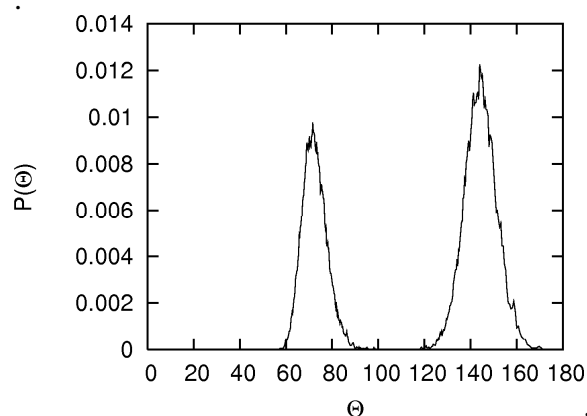


Рис. 4. Кутовий розподіл за кутами O_e-U-O_e між екваторіальними іонами кисню та ураном.

O^*-U-O^* . Така біпірамідальна пентакоординована структура добре узгоджується з даними квантово-хімічних розрахунків та експериментальних досліджень. Для перевірки, наскільки чітким є впорядкування екваторіальних сусідів, нами досліджено розподіл за кутами Θ з центром в іоні урану та променями, що проходять через екваторіальні іони кисню.

На рис. 4 зображено цей кутовий розподіл. Він характеризується двома піками з максимумами при ≈ 72 і 144° . Як і слід було очікувати, позиції піків відповідають розподілу по вершинах правильного п'ятикутника. Відзначимо лише певну розмитість кожного з піків на $20 - 30^\circ$, що є типовим при коливаннях у такому кластері. При цьому значення відстані між іонами кисню найближчих екваторіальних сусідів коливається в межах від $2,60$ до $3,65 \text{ \AA}$ при найбільш імовірному значенні $3,03 \text{ \AA}$.

Вище показано, що одна з ліганд зазнає гідролізу і один протон покидає гідратну оболонку. Очевидно, що решта екваторіальних молекул води, перебуваючи в полі іона уранілу, зазнає деформації. Такі зміни внутрішньомолекулярної структури молекул води в гідратній оболонці нами досліджено за допомогою розподілів для валентного кута Н-О-Н та середньої довжини зв'язку О-Н. Максимум першого розподілу припадає на значення $\approx 96^\circ$, у той час як середнє значення для цього кута в чистій воді, описаний у рамках моделі центральних сил, становить 99° . Крім того, досить інформативним є розподіл за довжинами зв'язків О-Н. Виявлено, що максимум цього розподілу припадає на значення $0,984 \text{ \AA}$, тоді як для чистої води в моделі центральних сил це значення дорівнює $0,974 \text{ \AA}$. Підсумовуючи ці два результати, можна стверджувати, що молекули води в гідратній оболонці зазнають деформації: видовжуються зв'язки О-Н і зменшується кут між ними.

Цікаво також дослідити, яким є оточення іонів кисню, що належать до уранілу. Для цього нами розраховано радіальні функції розподілу іонів кисню та водню води в околі іонів кисню O^* . На лівому графіку рис. 5 суцільною лінією показано функцію розподілу типу "кисень уранілу - кисень води" $g_{O^*O}(r)$, а також для порівняння наведено функцію розподілу типу "кисень - кисень" для чистої води в рамках моделі ЦС $g_{OO}(r)$ (штрихова лінія).

Як бачимо, перший пік розподілу $g_{O^*O}(r)$ з максимумом при $\approx 3,1 \text{ \AA}$, порівняно з $g_{OO}(r)$, є дещо зміщеним в область більших відстаней, а також ширшим і вищим. Це свідчить про нижчу строгість координації іонів кисню молекул води навколо іонів кисню уранілу. Правий графік рис. 5 демонструє хід функції біжучих координаційних чисел $n_{O^*O}(r)$, з якого можна бачити наявність дещо розмитого плато зі значенням 8 в області $\approx 3,5 - 3,7 \text{ \AA}$. Формування першого піка розподілу $g_{O^*O}(r)$ відбувається за рахунок п'яти екваторіальних сусідів уранілу, а також двох або трьох молекул води, що перебувають поза екваторіальною площиною. Оскільки перший пік не відділений від решти розподілу щільною, це говорить про можливість обміну неекваторіальних молекул з об'ємною фазою.

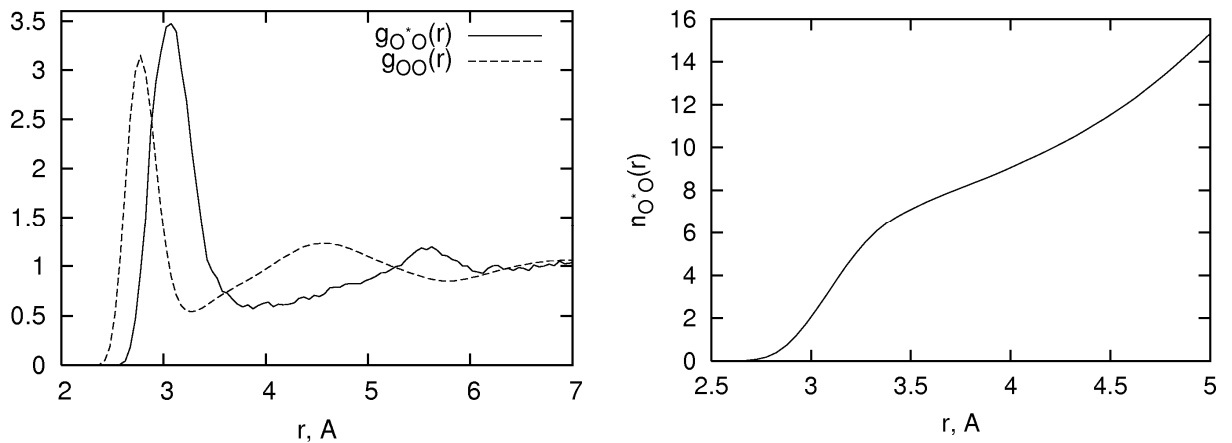


Рис. 5. Лівий графік - розподіл іонів кисню молекул води навколо іонів кисню уранілу $g_{O^*O}(r)$ (показано суцільною лінією). Для порівняння наведено радіальну функцію "кисень - кисень" $g_{OO}(r)$ у рамках моделі ЦС для чистої води (штрихова лінія). Правий графік - біжучі координаційні числа $n_{O^*O}(r)$.

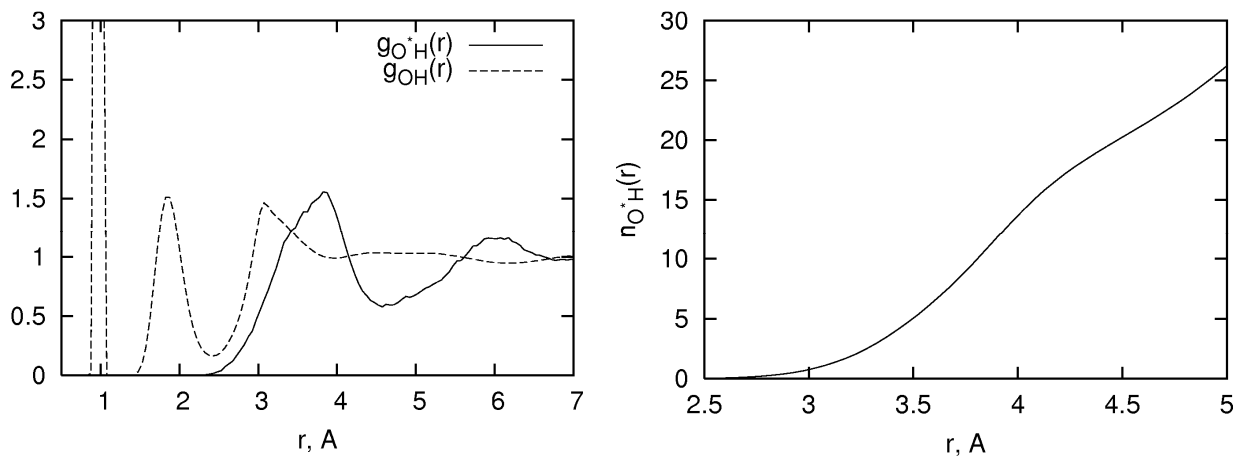


Рис. 6. Аналогічно рис. 5, лише для розподілу типу "кисень уранілу - водень".

Подібний аналіз доцільно провести і для розподілу "кисень уранілу - водень". На лівому графіку рис. 6 наведено функцію розподілу $g_{O^*H}(r)$ (суцільна лінія) порівняно з розподілом $g_{OH}(r)$ для випадку чистої води (штрихова лінія). На правому графіку показано біжучі координаційні числа $n_{O^*H}(r)$. Видно, що перший пік $g_{O^*H}(r)$ є доволі широким і розмитим і локалізований в області від 3 до 4 Å. Частково вклад в утворення цього піка відбувається за рахунок іонів водню екваторіальних сусідів, а частково від іонів водню молекул води, розміщених поза екваторіальною площиною. Зокрема, їх обміни з об'ємною фазою приводять до того, що перший пік не відділений щільною $g_{O^*H}(r) = 0$ від решти розподілу і, як наслідок, отримуємо нечітке плато на графіку відповідних біжучих координаційних чисел. Таким чином, можна стверджувати, що, крім п'яти екваторіальних сусідів, решта сусідів уранілу не є жорстко зв'язаними з гідратно-гідролізним комплексом.

Крім вивчення структурних властивостей, нами проведено дослідження динамічних властивостей. Зокрема, на основі інформації про координати і швидкості урану, іонів кисню уранілу та іонів кисню, що знаходяться в першій гідратній оболонці, нами розраховано автокореляційні функції швидкостей (АКФШ) для цих частинок і відповідні коливні спектри. Означення для АКФШ для частинки сорту α в момент часу t є таким:

$$\Psi_{\alpha}(t) = \langle \vec{v}_{\alpha}(0) \vec{v}_{\alpha}(t) \rangle, \quad (5)$$

де $v_{\alpha}(t)$ – швидкість частинки в момент t . На рис. 7 показано АКФШ урану $\Psi_U(t)$, іонів кисню уранілу $\Psi_{O^*}(t)$ та іонів кисню гідратної оболонки уранілу $\Psi_O(t)$.

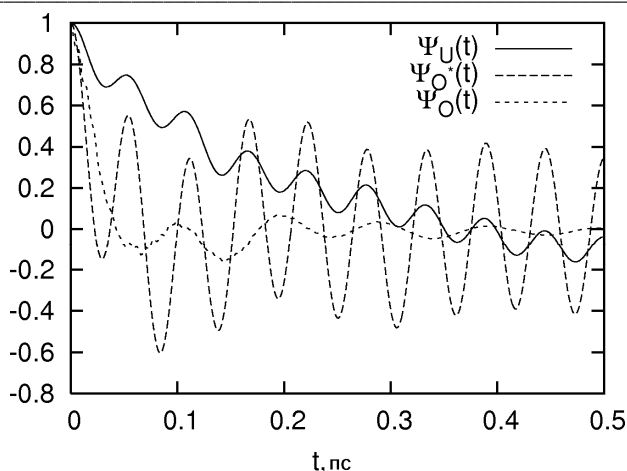


Рис. 7. Автокореляційні функції швидкостей урану $\Psi_U(t)$ (позначено суцільною лінією), іонів кисню уранілу $\Psi_{O^*}(t)$ (штрихова лінія) та іонів кисню його гідратної оболонки $\Psi_O(t)$ (пунктирна лінія).

Легко бачити, що АКФШ урану та іонів кисню уранілу характеризуються коливаннями однієї частоти. Це є наслідком накладання в рамках нашої моделі додаткової умови, щоби валентний кут O^*-U-O^* в іоні уранілу був рівний 180° . АКФШ для іонів кисню гідратної оболонки також характеризується чіткими коливаннями, хоча й меншої амплітуди та із швидшим загасанням. Виявити спільні коливання можна, зіставивши коливні спектри у спектрах цих іонів, які отримуємо згідно з формулою

$$f_\alpha(\omega) = \int_0^\infty \frac{\langle \vec{v}_\alpha(0) \vec{v}_\alpha(t) \rangle}{\langle (\vec{v}_\alpha(0))^2 \rangle} \cos(\omega t) dt. \quad (6)$$

На рис. 8 представлено коливні спектри урану $f_U(\omega)$, іонів кисню уранілу $f_{O^*}(\omega)$ та іонів кисню гідратної оболонки $f_O(\omega)$, а в табл. 3 зібрано характерні частоти коливних спектрів вищезгаданих частинок.

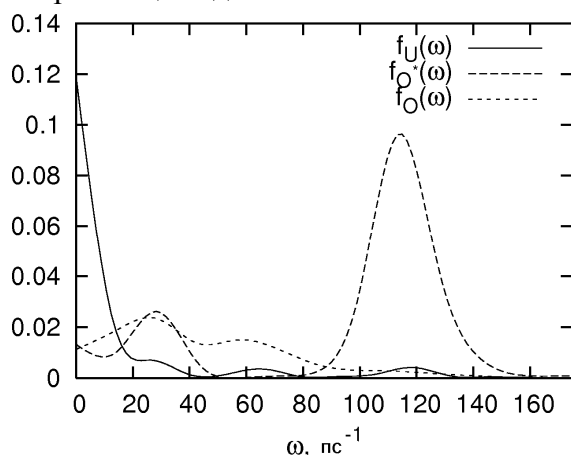


Рис. 8. Коливні спектри урану $f_U(\omega)$ (суцільна лінія), іонів кисню уранілу $f_{O^*}(\omega)$ (штрихова лінія) та іонів кисню його гідратної оболонки $f_O(\omega)$ (пунктирна лінія).

Таблиця 3. Характерні частоти в коливних спектрах урану $f_U(\omega)$, іонів кисню уранілу $f_{O^*}(\omega)$, іонів кисню гідратної оболонки $f_O(\omega)$ та коефіцієнти самодифузії

Іон	ω_1, ps^{-1}	ω_2, ps^{-1}	ω_3, ps^{-1}	$D \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{c}$
U	26,38	65,20	118,91	0,58
O*	28,02	-	114,20	0,69
O	25,98	59,88	-	0,91

Можна бачити, що в усіх трьох спектрах є спільний пік в околі частоти $\approx 26 \text{ ps}^{-1}$, що вказує на появу нормальних коливних мод у розглядуваному кластері. Ще один спільний пік у спектрах урану та іонів кисню гідратної оболонки в околі $\approx 60 \text{ ps}^{-1}$ говорить про наявність спільних коливань цих частинок. Наявність спільного коливного піка в спектрах урану та іонів кисню уранілу у височастотній області $115 - 120 \text{ ps}^{-1}$ є наслідком накладання умови на валентний кут в іоні уранілу.

Ще однією з динамічних характеристик, що були нами досліджені, є коефіцієнт само-дифузії іонів урану, кисню уранілу та іонів кисню з гідратної оболонки уранілу. Коефіцієнт самодифузії частинки сорту α згідно зі співвідношенням Гріна - Кубо виражається як

$$D_{\alpha} = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} \langle \vec{v}_{\alpha}(0) \vec{v}_{\alpha}(t) \rangle dt. \quad (7)$$

Розраховано коефіцієнти самодифузії $0,58 \cdot 10^{-5}$, $0,69 \cdot 10^{-5}$, $0,91 \cdot 10^{-5}$ см²/с для іонів урану, іонів кисню в уранілі та іонів кисню гідратної оболонки відповідно.

Висновки

У роботі представлено результати моделювання водного розчину уранілу. Показано, що гідратна оболонка уранілу характеризується біпірамідальною пентакоординованою структурою, а саме в площині, перпендикулярній до осі уранілу, розміщено п'ять сусідів: чотири молекули води й одна гідролізована група ОН. У результаті врахування ефекту перерозподілу заряду на продуктах гідролізу втрачений протон переходить в об'єм, а група ОН зміщується ближче до уранілу порівняно з іншими лігандами. Показано, що решта молекул води також зазнає деформації як за валентним кутом, так і за довжиною зв'язку О-Н. Проведено дослідження динамічних властивостей уранілу та його ліганд, зокрема представлено автокореляційні функції швидкостей, коливні спектри, коефіцієнти дифузії цих частинок. Аналіз спектрів частинок уранілу та сусідів з першої гідратної оболонки вказує на наявність спільних коливних частот у такому гідратно-гідролізному комплексі.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Spencer S., Gagliardi L., Handy N.C. et al.* Hydration of (UO₂)²⁺ and (PuO₂)²⁺ // *J. Phys. Chem. A.* - 1999. - Vol. 103. - P. 1831 - 1837.
2. *Tsushima S., Suzuki A.* Hydration numbers of pentavalent and hexavalent uranyl, neptunyl, and plutonyl // *J. Mol. Struct.* - 2000. - Vol. 529. - P. 21 - 25.
3. *Allen P.G., Bucher J.J., Shuh D.K et al.* Investigation of aquo and chloro complexes of (UO₂)²⁺, (NpO)²⁺, Np⁴⁺, and Pu³⁺ by X-ray absorption fine structure spectroscopy. // *Inorg. Chem.* - 1997. - Vol. 36. - P. 4676 - 4683.
4. *Dent A.J., Ramsay J.D.F., Swanton S.W.* An EXAFS study of uranyl ion in solution and sorbed onto silica and montmorillonite clay colloids // *J. Colloid Interface Sci.* - 1992. - Vol. 150. - P. 45 - 60.
5. *Hay P.J., Martin R.L., Schreckenbach G.* Theoretical studies of the properties and solution chemistry of (AnO₂)²⁺ and (AnO)²⁺ aquo complexes for An = U, Np, and Pu. // *J. Phys. Chem. A.* - 2000. - Vol. 104. - P. 6259 - 6270.
6. *Hemmingsen L., Amara P., Ansoborlo E.* Importance of charge transfer and polarization effects for the modeling of uranyl-cation complexes // *J. Phys. Chem. A.* - 2000. - Vol. 104. - P. 4095 - 4101.
7. *Tsushima S., Yang T., Suzuki A.* Theoretical Gibbs free energy study on UO₂(H₂O)_n²⁺ and its hydrolysis products // *Chem. Phys. Lett.* - 2001. - Vol. 334. - P. 365 - 373.
8. *Мусакович Т.С.* Гідроліз за участю іонів уранілу у водних розчинах // *Проблеми Чорнобиля.* - 2002. - Вип. 11. - С. 111 - 116.
9. *Guilbaud P., Wipff G.* Hydration of (UO₂)²⁺ cation and its (NO₃)⁻ and 18-crown-6 adducts studied by molecular dynamics simulations // *J. Phys. Chem.* - 1993. - Vol. 97. - P. 5685 - 5692.
10. *Guilbaud P., Wipff G.* Force field representation of the (UO₂)²⁺ cation from free energy MD simulations in water. Tests on its 18-crown-6 and (NO₃)⁻ adducts, and on its calix[6]arene⁶⁻ and CMPO complexes // *J. Mol. Struct.* - 1996. - Vol. 366. - P. 55 - 63.
11. *Greathouse J.A., O'Brien R.J., Bemis G., Pabalan R.T.* Molecular dynamics study of aqueous uranyl interactions with quartz (010) // *J. Phys. Chem. B.* - 2002. - Vol. 106. - P. 1646 - 1655.
12. *Duh D.M., Perera D.N., Haymet A.D.J.* Structure and properties of the CF1 central force model of water: integral equation theory // *J. Chem. Phys.* - 1995. - Vol. 102. - P. 3736 - 3746.
13. *Holovko M., Druchok M., Bryk T.* Primitive model for cation hydrolysis: a molecular dynamics study // *J. Chem. Phys.* - 2005. - Vol. 123. - P. 154505 - 154517.
14. *Druchok M., Bryk T., Holovko M.* A molecular dynamics study of uranyl hydration // *J. Mol. Liq.* - 2005. - Vol. 120, No. 1 - 3. - P. 11 - 14.

Надійшла до редакції 15.06.07

**14 ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ ГИДРАТАЦИИ И ГИДРОЛИЗА
В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ УРАНИЛА**

М. Ю. Дручок, М. Ф. Головки, Т. М. Брык

Предложена модель водного раствора уранила. В рамках этой модели проведено моделирование методом молекулярной динамики и исследованы структурные и динамические свойства уранила и его гидратной оболочки. Использование нежесткой модели центральных сил для описания воды дало возможность описать гидролиз воды под влиянием иона уранила и учесть эффекты перераспределения заряда на продуктах гидролиза.

**14 AN INVESTIGATION OF HYDRATION AND HYDROLYSIS EFFECTS IN URANYL
AQUEOUS SOLUTIONS**

M. Yu. Druchok, M. F. Holovko, T. M. Bryk

A model for uranyl aqueous solution is proposed. In the framework of this model a molecular dynamics simulation is performed and structural as well as dynamic properties of uranyl and its hydration shell are investigated. The utilization of non-rigid central force model for water allowed one to describe water hydrolysis caused by uranyl and to take into account the effects of charge redistribution on products of hydrolysis reaction.