

### Ионообменные процессы в мурманите

Научный руководитель – Еремин Николай Николаевич

*ван Динтерен-Товстопят София Владимировна*

*Аспирант*

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

*E-mail: tovstopyat.sofiya@mail.ru*

Проблема очистки промышленных сточных вод от токсичных тяжелых металлов, таких как свинец ( $Pb^{2+}$ ) и кадмий ( $Cd^{2+}$ ), остается актуальной экологической задачей, особенно для регионов с развитой горнодобывающей промышленностью (например, Кольского полуострова). Природные титаносиликаты, в частности мурманит, демонстрируют высокий ионообменный потенциал и рассматриваются как перспективные матрицы для создания селективных сорбентов. Однако их практическое применение сдерживается недостаточным пониманием механизмов внедрения катионов в кристаллическую структуру и сопутствующих структурных преобразований[1]. Поскольку детальное экспериментальное изучение этих процессов сопряжено с рядом трудностей, эффективным инструментом исследования выступает компьютерное моделирование.

Целью данной работы является разработка модели межатомных потенциалов для описания кристаллической структуры мурманита и процессов катионного обмена. На первом этапе исследования была создана базовая модель для чистого мурманита, воспроизводящая его кристаллическую решетку. Затем, опираясь на массив имеющихся экспериментальных данных, было проведено уточнение параметров модели для фаз, содержащих внедренные катионы тяжелых металлов —  $Cd^{2+}$  и  $Pb^{2+}$ .

Разработанная параметризованная модель позволяет проводить комплексное атомистическое моделирование поведения мурманита при катионном замещении. С ее помощью становится возможным рассчитать энергетически предпочтительные пути миграции тяжелых металлов в межпакетном пространстве структуры. В перспективе, после окончательной оптимизации параметров модели, планируется построение диаграмм смешения для исследуемых систем. Это позволит детально оценить термодинамическую устойчивость образующихся фаз твердых растворов и теоретически предсказать пределы замещения.

### Источники и литература

- 1) Паниковский, Т. Л., Калашникова, Г. О., Яковенчук, В. Н., Базай, А. В., Грязнова, Д. В., & Кривовичев, С. В. (2022). Механизм вхождения  $Pb^{2+}$  и  $Cd^{2+}$  в кристаллическую структуру мурманита,  $Na_2Ti_2(Si_2O_7)O_2 \cdot 2H_2O$ . Труды Ферсмановской научной сессии ГИ КНЦ РАН, (19), 275.