**Экспериментальное и теоретическое изучение компонентного состава бентонитовых глин: оценка изоморфного замещения Fe3+ методами ЭСДО и DFT**

***Ворожцов Е. П.,1 Голубков В.А.2, Лутошкин М.А.2, Бортников С. В.1***

*Студент, 4 курс бакалавриата*

*1Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова,*

*Институт естественных наук и математики, Абакан, Россия*

*2Институт химии и химической технологии СО РАН, Красноярск, Россия
E-mail:* *vorozhcov2001@mail.ru*

Бентонитовые глины представляют большую ценность, как минеральное сырьё. Так, бентониты, добываемые на территории Республики Хакасия, за счёт своих уникальных свойств пользуются большим спросом в литейной и металлургической промышленности, в нефтедобыче как компонент буровых растворов и во многих других областях технологии [1]. Основным компонентом, определяющим пригодность глин, являются минералы группы смектита, в основном монтмориллонит. При модификации кальциево-магниевых форм монтмориллонит – замене двухвалентных ионов Ca2+ и Mg2+ на одновалентные ионы Na+ – расширяется перечень потенциальных сфер применения [2].

Компонентный анализ алюмосиликатов осложняется микронным и субмикронным размером агрегатов частиц, присутствием примесей и смешаннослойных образований. Наиболее успешным методом определения компонентного (минералогического) состава бентонита является метод порошковой рентгеновской дифракции (РФА) с моделированием по методу Ритвельда [3].

Нами проведено исследование глин месторождений «Кайбальское-2» и «10-й Хутор», расположенных на территории Республики Хакасия. Методом РФА количественно определён компонентный состав: основным компонентом является монтмориллонит (50-70 %), основная примесь – кварц (10-20 %), также присутствуют каолин, полевые шпаты, иллит, мусковит, кальцит, анатаз. Результаты уточнения по методу Ритвельда хорошо согласуются с элементным (силикатным) анализом, но высокое содержание Fe в некоторых образцах, значительно выше, чем предполагают структурные модели, при этом фаз с очевидно высоким содержанием Fe не выявлено. Однако Fe может быть связано и с другими фазами в качестве изоморфного заместителя в монтмориллоните. Это же подтверждено более низкой термической стабильностью таких глин (ТГ-ДСК), их более высокой удельной ёмкостью катионного обмена. Анализ электронных спектров диффузного отражения (ЭСДО) также не выявил минералов, характеризующихся высоким содержанием Fe. Нами обнаружена связь между оптическими свойствами и содержанием Fe, изоморфно замещённого в октаэдрических решётках монтмориллонита. В рамках DFT и TD-DFT были смоделированы электронные спектры ячейки монтмориллонита, в которых Al был замещён на Fe. Теоретически рассчитанные и экспериментальные спектры показали хорошее качественное согласие. Таким образом, ЭСДО можно рассматривать как простую и экспрессную методику оценки изоморфного замещения Fe в монтмориллоните.

*Исследование выполнено за счет гранта Министерства образования и науки Республики Хакасия (Соглашение № 90 от 12.12.2022). Авторы благодарят ООО «Бентонит Хакасии» за предоставленный для изучения образцы.*

**Литература**

1. Белоусов П. Е. и др. Бентонитовые глины месторождения 10-й Хутор (Республика Хакасия): особенности генезиса, состава и адсорбционных свойств // Вестник РУДН. Серия: Инженерные исследования. 2017. Т. 18. №. 1. С. 135-143.

2. Гуска Р. В., Голубков В. А., Ворожцов Е. П. Обогащение природной бентонитовой глины однозарядными катионами // Межд. журнал ГиЕН. 2020. №. 1-1. С. 201-204.

3. Белоусов П. Е. и др. Количественные методы определения содержания монтмориллонита в бентонитовых глинах // Георес. 2020. Т. 22. №. 3. С. 38-47.