

**Теоретический анализ путей миграции катионов в структурах микропористых цирконосиликатов****Научный руководитель – Аксёнов Сергей Михайлович***Кобелева Е.А.<sup>1</sup>, Гридин Д.М.<sup>2</sup>*

1 - Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия, *E-mail: dinka.lenooo@gmail.com*; 2 - Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия, *E-mail: master.sudbi@yandex.ru*

Кристаллические структуры природных и синтетических циркосиликатов с общей формулой  $\{Zr_m[Si_nO_{3m+2n}]\}^{-2m}$  характеризуются преимущественно изолированными  $ZrO_6$  октаэдрами, объединенными тетраэдрическими силикатными анионами островного, кольцевого, цепочечного, ленточного, слоистого и каркасного типов [1]. При этом, цирконосиликаты зачастую обладают микропористым строением, что делает их перспективными материалами в качестве катализаторов, сорбентов и ионообменников [1,2]. В частности, ионообменные свойства, а также структурные превращения при дегидратации экспериментально изучались для терскита  $Na_4[Zr[Si_6O_{15}]](OH)_2 \cdot H_2O$  [3], эльпидита  $Na_2\{Zr[Si_6O_{15}]\} \cdot 3H_2O$  [4] и др. Теоретический анализ путей миграции катионов на основе топологических методов был также выполнен для структур келдышита  $NaH\{Zr[Si_2O_7]\}$  и паракелдышита  $Na_2\{Zr[Si_2O_7]\}$  [5].

Для анализа путей миграции ионов в цирконосиликатах с использованием программы ToposPro [6] были взяты модели структур из базы данных ICSD. В основе данного подхода лежит разбиение Вороного-Дирихле, которое позволяет получить адекватную карту системы полостей и каналов. Поскольку не все пустоты и каналы являются значимыми, были выбраны следующие критерии значимости: радиус элементарной пустоты ( $R_{sd}$ ) и радиус элементарного канала ( $R_{chan}$ ).

Данный подход позволил выделить и охарактеризовать различные пути миграции щелочных катионов, а также катионов  $Ag^+$  и  $Pb^{2+}$  в структурах природных и синтетических цирконосиликатов, что может служить основой для направленного поиска и синтеза материалов с эффективными ионообменными свойствами.

Авторы выражают благодарность своему научному руководителю Аксёнову С.М. (ФИЦ КНЦ РАН). Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 20-77-10065.

**Источники и литература**

- 1) Zubkova N.V., Pushcharovsky D.Yu. // Z. Kristallogr. 2008. V. 223. P. 98.
- 2) Чуканов Н.В., Пеков И.В., Расцветаева Р.К. // Успехи химии. 2004. Т. 73. № 3. С. 227.
- 3) Чуканов Н.В., Казаков А.И., Пеков И.В., Григорьева А.А. // Журнал физической химии. 2010. Т. 84. № 12. С. 2353.
- 4) Зубкова Н.В., Ксенофонтов Д.А., Кабалов Ю.К. и др. // Неорганические материалы. 2011. Т. 47. № 5. С. 575.
- 5) Kabanova N.A., Panikorovskii T.L., Shilovskikh V.V. et al. // Crystals. 2020. V. 10. Art. 1016.
- 6) Blatov V.A., Shevchenko A.P., Proserpio D.M. // Cryst. Growth Des. 2014. V. 14. P. 3576.