Применение методов рентгеновской спектроскопии XAFS и последовательного фракционирования для исследования механизмов сорбции Cu (II) почвами и минеральными фазами Невидомская Д.Г., Минкина Т.М., Шуваева В.А., Бурачевская М.В.

Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, <u>dnevidomskaya@mail.ru</u>

В настоящее время актуальной является разработка методов и подходов для объективной оценки и прогноза экологического состояния почв в условиях загрязнения. Использование методов химического экстракционного фракционирования соединений металлов, показало, что химические реагенты должны максимально обеспечивать полноту и селективность извлечения тех или иных соединений металлов. Однако при работе с такой сложной полидисперсной гетерогенной системой, как почва, это практически недостижимо из-за проблем внутренней пространственной неоднородности почвенных образцов. Развитие прямых физических методов рентгеноадсорбционной спектроскопии, реализуемых на источниках синхротронного излучения, обеспечило принципиально новые возможности анализа различных природных образований. Эти методы позволили получать информацию структурной организации исследуемых объектов на основе спектров их рентгеновского поглощения.

В минеральной фазе черноземов значительную долю составляют вторичные глинистые минералы и карбонаты. Поэтому исследование механизмов поглощения тяжелых металлов этими фазами представляет особый интерес.

Целью настоящей работы было изучение взаимодействия ионов Cu²⁺ с почвенной матрицей чернозема обыкновенного карбонатного и минеральными фазами слоистых силикатов с использованием метода химического последовательного фракционирования по схеме Миллера (Miller et al., 1986) и комплекса рентгеновских синхротронных методов, включая порошковую дифракцию (XRD) и спектроскопию рентгеновского поглощения XAFS (X-ray absorption fine structure). Съемка образцов была станции «Структурное материаловедение», выполнена на расположенной на канале 1.36 Курчатовского центра синхротронного излучения НИЦ «Курчатовский институт». Источником синхротронного излучения на канале 1.36 служит поворотный магнит с полем 1.7 Тл накопительного кольца «Сибирь-2». Для изучения влияния органоминеральной матрицы на поглощение ионов Cu²⁺ был заложен модельный лабораторный эксперимент. Период инкубации почвы с соединениями Cu (CuO и Cu(NO₃)₂ в дозе 2000 мг/кг) составил 3 года.

Показано, что форма поступления Cu в чернозем обыкновенный в виде монооксида (CuO) и соли ($Cu(NO_3)_2$) влияет на трансформацию соединений Cu и их сродство с фазами-носителями металлов. Установлено, что при загрязнении почв растворимой солью Cu^{2+} увеличивается биодоступность металла, возрастает доля органического вещества и оксидов Fe в закреплении и удерживании Cu. За период инкубации почвы с монооксидом Cu возрастает содержание металла в остаточной фракции, что, с одной стороны, связывается с возможностью вхождения Cu в состав силикатов в виде изоморфных примесей, а с другой стороны, с неполным растворением экзогенных соединений при высоком уровне их поступления в почву.

Выявлен превращений механизм структурных минералов, показывающий, что вследствие ионнообменных процессов сорбция присутствующих в насыщенном растворе ионов Cu²⁺ происходит активными центрами внутренней поверхности кристаллической решетки диоктаэдрических алюмосиликатов. При этом главная роль принадлежит поверхностным гидроксилам атома алюминия октаэдрической координации. Рентгеноструктурная диагностика позволила установить, что избыток ионов Cu²⁺ удаляется из системы за счет новообразования и осаждения крупнокристаллической фазы минерала герхардтита $Cu_2(NO_3)(OH)_3$ (Minkina et al., 2018).

Работа выполнена при поддержке Гранта РНФ 19-74-00085.