



**СТРУКТУРА
И ДИНАМИКА
МОЛЕКУЛЯРНЫХ
СИСТЕМ**

**Сборник тезисов
XVIII Всероссийской конференции
с элементами научной
школы для молодежи**

Казань 2011

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
РОССИЙСКИЙ ФОНД ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
КАЗАНСКИЙ (ПОВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ И ЭЛЕКТРОХИМИИ РАН
МАРИЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МОЛЕКУЛ И КРИСТАЛЛОВ УНЦ РАН
ООО "ИНЖЕНЕРНЫЙ ЦЕНТР МР"
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН



**СТРУКТУРА
И ДИНАМИКА
МОЛЕКУЛЯРНЫХ
СИСТЕМ**

Сборник тезисов
XVIII Всероссийской конференции

СПОНСОР ООО «BRUKER» МОСКВА

Казань.
2011

УДК 539.19
ББК 22.36
С 87

Редакционная коллегия:

Скирда В.Д., Васильев Г.И., Журавлева Н.Е.

Сборник тезисов издан при финансовой поддержке Министерства образования
и науки Республики Татарстан и
спонсорской поддержке ООО «Брукер» Москва
ООО «Инженерный центр МР»

*Материалы сборника напечатаны
с представленных авторами оригиналов*

С 87 **Структура и динамика молекулярных систем:** Сб. тезисов
XVIII Всероссийской конференции «Структура и динамика молекуляр-
ных систем». Казанский (Поволжский) федеральный университет 2011. -
192 с.

Сборник составлен по материалам представленным участниками
XVIII Всероссийской конференции «Структура и динамика молекуляр-
ных систем», состоявшейся с 4 по 9 Июля 2011 г. в Казани. Издание пред-
ставляет интерес для физиков, химиков, биологов, медиков и специали-
стов других отраслей знания, которые занимаются исследованиями моле-
кулярной подвижности в гетерогенных средах.

УДК 539.19
ББК 2236

© Казанский федеральный
университет, 2011

УДК 631.417: 552

ПРИРОДНЫЕ ОРГАНО-СМЕКТИТЫ И ИХ ДИАГНОСТИКА¹Шинкарев А.А., Гиниятуллин К.Г., Шинкарев (мл) А.А., Исламова Г.Г.,
Губайдуллина А.М., Кринари Г.А., Лыгина Т.З., Манапов Р.А. Пятаев А.В.*E-mail: ashinkar@mail.ru***Ключевые слова:** природные органо-сметитовые структуры, концентрация сметита.

Диагностика сметитов в глинистых породах основана на интерпретации данных рентгенографического фазового анализа по базальным отражениям от ориентированных препаратов до и после их соответствующих обработок. Для искусственных органо-глин известно, что интеркалирование сметитов относительно простыми органическими молекулами приводит к формированию регулярных тактоидов и появлению целочисленного спектра 00L рефлексов от расстояния d_{001} , сильно смещенного в малоугловую область. Полимеризация мономеров в межслоевом пространстве, постепенно развиваясь, может изменять дисперсионное состояние сметита от интеркалированного до эксфолиированного и приводит либо к существенному ослаблению, либо к полному исчезновению базальных рефлексов от сметитов на дифракционных картинах.

В лабораторных экспериментах и на примере разновозрастных черноземных почв показано, что формирование органо-минеральных композиций, в которых органическое вещество (ОВ) связано не только на поверхности глинистых частиц, но и интеркалировано в лабильном межслоевом пространстве, является обычным механизмом трансформации сметитовых фаз при взаимодействии с ОВ в природных условиях. Однако при наличии ОВ в лабильных промежутках фаз иллит-сметит степень соответствия между содержанием любых глинистых минералов и амплитудами их рефлексов не поддается строгой оценке. Для условий допускавших и допускающих интенсивное взаимодействие глинистых минералов с природным ОВ диагностика и оценка реальной структуры сметитовой составляющей осадочных пород и почв должны проводиться с привлечением комплекса независимых аналитических методов.

Полезными инструментами для количественной характеристики минеральных фаз способных к структурному набуханию являются адсорбционно-люминесцентный анализ и исследование термического поведения образцов после насыщения этиленгликолем. Для корректной интерпретации данных рентгенографического фазового анализа при исследовании природных объектов потенциально содержащих органо-сметиты эти методы дополнены изучением структурного состояния ионов железа в силикатных наноблоках глинистых минералов методами мессбауэровской спектроскопии. Найдено также, что ~ 10% атомов железа в виде оксида и гидроксида находится, возможно, в лабильном межслоевом пространстве органо-сметитов.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 11-04-00522).