

ДИФФУЗИЯ КАТИОНОВ В ДВОЙНОЙ СЛОЕ МИНЕРАЛА ГЛИНА

Ван Цайлунь, Шукшина Д.Д.

Научный руководитель: Мышкин В.Ф., д.ф.-м.н., профессор
Томский политехнический университет, 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 2
E-mail: caylun1224@gmail.com

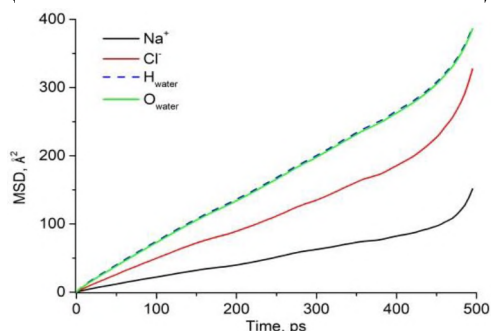
Адсорбция гидратированных ионов металлов на поверхности минералов глины обычно контролирует их распределение в природных и технологических средах. В частности, чрезвычайно низкая проницаемость природных глинистых образований делает их потенциальным носителем для долгосрочного геологического захоронения токсичных или радиоактивных отходов, хранения углекислого газа и реактивной транспортировки в контролируемой среде. Поэтому очень важно изучать влияние поверхности глины на диффузию ионов и молекул воды.

Среднеквадратичное смещение (MSD) представляет собой расстояние мгновенного прыжка частицы от исходного положения до некоторой точки, при диффузии, и используется для расчета коэффициента самодиффузии. Самодиффузия является важным параметром подвижности. Чем выше коэффициент диффузии (одного вещества относительно другого), тем быстрее они проникают друг в друга. Коэффициент самодиффузии можно определить из соотношения:

$$D = \frac{1}{6} \cdot \frac{d}{dt} \langle (R(t) - R(0))^2 \rangle, \quad (1)$$

где $R(0)$, $R(t)$ – начальное и конечные положения частицы через время t .

На рисунке представлены рассчитанные нами кривые, показывающие MSD различных частиц в двойном диффузионном слое (ДДС), формирующимся на поверхности иллитовой глины. Из графиков следует, что коэффициент диффузии Na^+ составляет $3,75 \cdot 10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}$, Cl^- – $8,57 \cdot 10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}$ и воды – $1,13 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$. Коэффициент диффузии аниона по краевой поверхности кристаллита глины более чем 2 раза больше, чем катиона. Однако при больших расстояниях между слоями глины или по поверхности частицы глины подвижность анионов больше подвижности катионов [1].



В докладе обсуждается процесс поверхностной диффузии ионов. Наблюдается корреляция коэффициента диффузии от параметров глины и солености водного раствора. Установлено, что поверхностная диффузия более медленная, чем диффузия между слоями минерала глины.

1. Glaus M. A. et al. Diffusion of ^{22}Na and ^{85}Sr in montmorillonite: evidence of interlayer diffusion being the dominant pathway at high compaction // Environmental science & technology. – 2007. – V. 41. – №. 2. – P. 478-485.