

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ O^- И H^+ В ГИДРАТНОЙ ОБОЛОЧКЕ ИОНОВ ПРИ ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С МИНЕРАЛОМ ГЛИНЫ

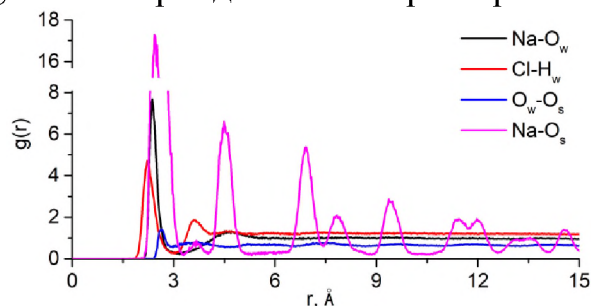
Ван Цайлунь, Шукшина Д. Д.

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

Глинистые минералы широко распространены в окружающей среде. Благодаря своим физико-химическим свойствам и возможности к набуханию при контакте с водой, они стали предметом исследований во многих областях.

Гидратированные ионы в процессе диффузии взаимодействуют с поверхностью глины с образованием комплексов внутренней и внешней сфер. Поэтому гидратация влияет на коэффициент диффузии ионов. Для анализа параметров гидратной оболочки межслоевых катионов может быть использована функция радиального распределения (RDF).

На рисунке представлены RDF-кривые при взаимодействии ионов Na^+ с атомами молекул воды, имеющими частичный заряд, и поверхностью глины. Используются следующие обозначения: O_w – кислород воды, H_w – водород воды, O_s – кислород на поверхность глины. Можно видеть, что кривые распределения $Na-O_w$ и $Cl-H_w$ имеют два пика, которые представляют первый и второй слои гидратной оболочки вокруг иона Na^+ . При этом расстояние между Cl^- и водородом молекулы воды меньше, чем расстояние между Na^+ и кислородом воды. Распределение ионов Na^+ , относительно базальной поверхности минерала глины, имеет периодический характер.



Ионы Na^+ также взаимодействуют с кислородом на поверхности глины O_s , сила взаимодействия которых уменьшается с каждым слоем гидратной оболочки. Отрицательный заряд на базальной поверхности слоя глины притягивает атомы водорода, входящие в молекулу воды и в то же время отталкивает атомы кислорода молекулы воды.

По мере увеличения гидратной оболочки расстояние между молекулами воды и катионами увеличивается, а сила притяжения уменьшается. Поэтому наличие гидратной оболочки катионов уменьшает коэффициент диффузии из-за увеличения их эффективной массы и увеличивает его из-за отдаления от фиксированных на базальных поверхностях зарядов.

1. Rinnert E. et al. Hydration of a synthetic clay with tetrahedral charges: a multidisciplinary experimental and numerical study // The Journal of Physical Chemistry B. – 2005. – V. 109. – №. 49. – P. 23745-23759.