

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ИОНОВ И МОЛЕКУЛ ВОДЫ ПО ПОВЕРХНОСТИ ЧАСТИЦЫ ИЛЛИТА

В.Ф. Мышкин¹, Ван Цайлунь¹, В.А. Хан^{1,2},
А.П. Барабан³, А.Д. Побережников¹, Д.Д. Шукшина¹

¹ *Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия*

² *Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, Россия*

³ *Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия*

Рассматривается процесс диффузии ионов Na^+ и Cl^- в поровой жидкости между микрочастицами минерала иллит. Приводятся результаты квантово-химического моделирования с помощью программного комплекса Materials Studio. Из-за заряда на поверхности слоя глины формируется распределение потенциала, которое искажает равномерное распределение катионов и анионов, наблюдающихся в объемном растворе. Поэтому непосредственно у поверхности микрочастицы формируется слой неподвижных катионов. По мере удаления от поверхности увеличивается содержание анионов, а потенциал уменьшается до нуля. Формируется двойной электрический слой, в котором отличаются условия диффузии катионов. Скорость миграции частиц по внешней поверхности микрочастицы глинистого минерала иллит уменьшается в ряду: вода, анион и катион.

Ключевые слова: иллит, кристаллит, внешняя диффузия, катион, анион, вода, радиальная функция распределения.

Введение

Благодаря высокой адсорбционной способности и низкой гидравлической проводимости глина играет жизненно важную роль в почвоведении, науке об окружающей среде, а также при захоронении радиоактивных отходов. Процессы взаимодействия минерала с ионами и водой определяют состав и величины потоков водных растворов, условия миграции химических элементов, минеральные изменения в почве при попадании химических соединений, выветривание и возможности по впитыванию воды (набухаемость) породами в зоне их обнажения. Набухаемость глинистых минералов изменяется при обмене катионами между слоями, что связано с состоянием гидратации катионов, находящихся в растворе у поверхности минерала [1]. Состояние гидратации ионов в водном растворе сильно различается для ионов разных химических элементов, в том числе для ионов одинаковой валентности.

Природные глины, используемые для захоронения ядерных отходов [2], в основном представляют собой смесь таких минералов, как монтмориллонит, иллит и каолинит. Эти минералы широко распространены в России. Поведение монтмориллонита при впитывании воды изучалось многими исследователями [3, 4]. Способность поверхности микрочастиц минерала иллит связывать ионы и воду менее изучена.

Способность глинистых минералов противодействовать миграции радионуклидов связана с объемной и поверхностной сорбцией ионов, а также скоростью их диффузии внутри и по поверхности частицы минерала. Экспериментально определяемая скорость диффузии катионов через уплотненный слой глины зависит также от скорости диффузии по поровой воде. Вклад этих компонентов в экспериментально наблюдаемую величину можно разделить лишь путем моделирования.

Цель настоящего исследования – изучение диффузии частиц по поверхности микрочастиц минерала иллит, а также в воде, отстоящей от минерала на расстояния менее 100 Å.

В данной работе приведены результаты моделирования методом молекулярной динамики физических свойств системы, содержащей внешнюю поверхность иллита (грань 001), воду и ионы. Получаемые при этом результаты позволяют сравнивать поведение ионов и молекул воды с микроскопической точки зрения и адекватно описывать механизм их движения по поверхности микрочастиц глины.

Методы моделирования

Минералы глины содержат параллельные слои атомов, объединенных ковалентной связью, между которыми располагаются катионы и молекулы воды. Иллит представляет собой минерал, каждый слой которого содержит два тетраэдрических силикатных листа, между которыми расположен октаэдрический лист оксида алюминия – это структура 2:1. Кристаллическая структура ил-

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>