

## 水化Na-蒙脱石和Na/Mg-蒙脱石的分子动力学模拟

那平;张帆;李艳妮

天津大学化工学院, 天津 300072

摘要:

利用分子动力学方法(MD)研究了Na-蒙脱石和Na/Mg-蒙脱石层间的补偿阳离子和水分子的结构及扩散性质. 模拟结果表明, 在一定水含量范围内Na-蒙脱石和Na/Mg-蒙脱石表现出不同的膨胀形式. 特别是层间水分子数目在48~72之间时, Na/Mg-蒙脱石的层间距比Na-蒙脱石有较为明显的增大. Na<sup>+</sup>的层间水分子与Mg<sup>2+</sup>形成了明显的两层水合壳. 而与Na<sup>+</sup>只形成了一层平面的水合壳. 在Na/Mg-蒙脱石中, Na<sup>+</sup>和 Mg<sup>2+</sup>的扩散方式不同, Na<sup>+</sup>的扩散范围相对更广, 自扩散系数更大. Na/Mg-蒙脱石比相同水含量下的Na-蒙脱石层间水的自扩散系数小. 由于Mg<sup>2+</sup>和Na<sup>+</sup>对层间结构的强烈影响, 从Na<sup>+</sup>的Na/Mg-蒙脱石与Na-蒙脱石表现出不同的膨胀性质和层间物质的扩散性质.

关键词: Na-蒙脱石 Na/Mg-蒙脱石 分子动力学 水合性质 自扩散

收稿日期 2006-05-08 修回日期 2005-05-30 网络版发布日期 2006-09-04

通讯作者: 那平 Email: naping@tju.edu.cn

本刊中的类似文章