黏土膨胀收缩与离子分配耦合机制获揭示

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/10525.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

黏土膨胀收缩与离子分配耦合机制获揭示。中国科学院广州地球化学研究所特任研究员陈锰、博士研究生周慧君等通过研究，揭示了黏土膨胀/收缩与离子分配的耦合机制。相关研究7月14日在线发表于《地球化学与宇宙化学学报》。

审稿人指出，30多年前地球化学家基于海底钻探的流体成分记录就对黏土的离子过滤作用非常感兴趣，然而理论研究工作一直陷于停滞。该研究打开了重要的理论分析窗口，以本模型研究为开端，系统地解释和预测黏土矿物对多离子体系物质分配影响的研究预期将可顺利开展。

富含黏土的地层与沉积物被视为地质过滤膜。蒙脱石是常见黏土沉积物的主要组成矿物。蒙脱石的层间域具有水化和脱水的能力，在宏观上反映为黏土的膨胀与收缩。过往研究表明，不同离子造成蒙脱石层间域水合状态的差异。然而层间域水合状态的差异如何与离子的分配耦合？宏观上，黏土的膨胀/收缩如何影响地层或沉积物的地质过滤膜功能？

针对以上问题，研究人员通过结合分子动力学模拟和热力学计算，建立了离子活度比、水活度、蒙脱石水含量与离子分配系数间的定量关系。研究选取常见的离子Na离子和K离子作为研究对象，力图解释沉积物记录中Na离子和K离子分配差异的原因，并建立模型用于预测黏土对流体离子分配的作用。

该研究对象为处于热力学平衡的多个体系，其一为含Na离子和K离子的蒙脱石混合物体系，其二为含Na离子和K离子的流体。以离子活度比和水活度为环境变量，基于分子动力学模型模拟进行热力学计算，阐明了平衡状态下蒙脱石的水含量与离子分配系数问题。

研究表明，任何环境条件下K离子都较Na离子更富集于蒙脱石中，与此同时环境中K离子显著亏损；环境水活度的下降显著加强了离子分配，即K离子在环境中的亏损更为明显；离子分配耦合于蒙脱石的水合结构，K离子在蒙脱石层间形成内圈络合结构，以致在较低水活度条件下蒙脱石层间形成稳定的单层水合结构，这是K离子更富集于蒙脱石层间的原因。

该计算模拟研究阐释了由于离子在蒙脱石层间域不同的水合结构造成了Na离子和K离子分配的显著差异，解释了地质记录与过往的实验结果。（来源：中国科学报朱汉斌 邓土连）

相关论文信息：https://doi.org/10.1016/j.gca.2020.07.007

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转

载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。
作者：陈锰等 来源：GCA

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发