

水滑石超族矿物的多型结构

陈锰, 朱润良, 朱建喜, 何宏平

(中国科学院 矿物学与成矿学重点实验室/广东省矿物物理与材料研究开发重点实验室, 中国科学院 广州地球化学研究所,
广东 广州 510640)

层状的水滑石超族矿物(LDH)在土壤中的稳定存在对阴离子(CO_3^{2-} , SO_4^{2-} , NO_3^- , Cl^- 等)和二价过渡金属离子的封存起到重要作用。LDH是层状矿物,由含金属阳离子的固定片层和活动的层间阴离子、水分子组成。片层的堆垛方式差异形成了一系列多型,如3R1(原胞由3个片层组成,三方晶系,菱面体格子)和1T(原胞为单个片层,三方晶系,六方格子)。多型由片层阳离子组成、层间阴离子类型、水含量等因素决定。笔者使用了分子动力学模拟手段系统分析了这些因素对LDH多型结构的影响。层间离子为 NO_3^- 时,水含量的上升会使LDH的结构由3R1向1T转变。伴随多型转变,层间距上升, NO_3^- 的构型由D3h向C2v对称性转变。当片层的二价/三价离子比例更低时,多型转变出现于更低的水含量。而当层间离子为 SO_4^{2-} 时,水含量的变化造成三阶段的多型转变。第一和第三阶段的多型均为3R1多型,而中间阶段的多型与阳离子比例相关,为1T多型或出现随机混层现象。中间阶段以出现较高比例的Cs构型 SO_4^{2-} 为标志,而在其余情况, SO_4^{2-} 大多为C3v构型。对于层间为 SO_4^{2-} 的情况,多型转变的水含量几乎与阳离子比例无关。层间为 CO_3^{2-} 或 Cl^- 时,水含量的变化不会造成多型的改变,始终为3R1多型。层间阴离子的构型反映了局域的氢键作用,而片层的堆垛会影响长程的静电作用。局域的氢键作用和长程的静电作用共同维系水滑石超族矿物的结构与稳定性。

基金项目: 中国科学院前沿科学重点研究项目(QYZDJ-SSW-DQC023-4)

作者简介: 陈锰, 博士, 副研究员. E-mail: chenmeng@gig.ac.cn