

## ДИФFUЗИЯ ОДНОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ В ЛЁГКОЙ И ТЯЖЕЛОЙ ВОДЕ ПРИ 298,15 К

Булавин В.И.<sup>1</sup>, Вьюнник И.Н.<sup>2</sup>, Крамаренко А.В.<sup>1</sup>,  
Русинов А.И.<sup>1</sup>, Волобуев М.Н.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Национальный технический университет  
"Харьковский политехнический институт",

<sup>2</sup> Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина,  
г. Харьков

В настоящей работе с использованием авторской методики [1] были рассчитаны коэффициенты диффузии ( $D_i^0$ ) и микроскопические характеристики диффузионного смещения (МХДС) (длина ( $\bar{d}_i$ ), время ( $\tau_i$ ), скорость ( $V_i$ )) для 11 однозарядных ионов в лёгкой ( $H_2O$ ) и тяжелой ( $D_2O$ ) воде на основании литературных данных по подвижности этих ионов при 298,15 К [2]. В табл. 1 представлены рассчитанные нами величины  $D_i^0$  и МХДС ионов в виде отношения значений каждого из параметров в лёгкой и тяжелой воде. Здесь  $r_i$  – структурный радиус иона.

Таблица 1

Параметр	Отношение параметра иона в $H_2O$ к этому же параметру в $D_2O$ (изотопный эффект)										
	$Li^+$	$Na^+$	$K^+$	$Cs^+$	$Me_4N^+$	$Et_4N^+$	$Pr_4N^+$	$Bu_4N^+$	$Cl^-$	$Br^-$	$I^-$
$D_i^0 \cdot$	1,233	1,204	1,198	1,196	1,226	1,237	1,242	1,238	1,216	1,208	1,204
$\bar{d}_i$	0,992	1,017	1,025	1,026	0,997	0,993	0,985	0,992	1,008	1,009	1,026
$(\bar{d}_i - r_i)$	0,988	1,037	0,727	0,939	0,963	0,966	0,959	0,980	0,984	0,988	0,971
$\tau_i$	0,797	0,856	0,875	0,878	0,806	0,799	0,783	0,789	0,837	0,846	0,873
$V_i$	1,238	1,186	1,172	1,167	1,236	1,248	1,244	1,265	1,203	1,196	1,174

Из данных табл. 1 следует, что изотопный эффект более существенно проявляется для величин  $D_i^0 \cdot$  и  $V_i$ . При этом коэффициент диффузии в  $H_2O$  в  $\sim 1,2$  раза больше, чем в  $D_2O$ . Время же диффузионного смещения ионов ( $\tau_i$ ), наоборот, в  $D_2O$  в  $\sim 1,2$  раза больше, чем в  $H_2O$ . Отношения параметров  $(\bar{d}_i - r_i)$  и  $\bar{d}_i$  близки к 1 (кроме  $K^+$ ), что указывает на ослабление изотопного эффекта. Известно [1], что параметр  $(\bar{d}_i - r_i)$  является мерой ближней сольватации. В табл. 2 приведены результаты расчета знака параметра  $(\bar{d}_i - r_i)$  для этих ионов в  $H_2O$  и  $D_2O$ . Знак «+» соответствует положительной, знак «-» – отрицательной сольватации.

Таблица 2

Р-ритель	$Li^+$	$Na^+$	$K^+$	$Cs^+$	$Me_4N^+$	$Et_4N^+$	$Pr_4N^+$	$Bu_4N^+$	$Cl^-$	$Br^-$	$I^-$
$H_2O; D_2O$	+	+	-	-	+	+	+	+	-	-	-

### Литература:

1. Bulavin V.I., V'yunnyk I.M., Lazareva Ya.I. Diffusion and microscopic characteristics of singly charged ion transfer in extremely diluted aqueous solutions. *Ukrainian Journal of Physics*. 2017. Vol. 62, № 9. P. 769–778.
2. Swain C.G., Evans D.F. Conductance of ions in light and heavy water. *Journal of the American chemical society*. 1966. Vol. 19, No 3. P. 383–390.