

Кинетические свойства тяжелых ионов в сильно неидеальных системах

Е.С.Якуб

Одесский государственный экономический университет, Одесса, Украина

(Тезисы доклада)

Кинетические характеристики поливалентных ионов актинидов и лантанидов представляют значительный интерес в разработке современных технологий, в т.ч. электролитической сепарации ядерных отходов.

В докладе представлены результаты молекулярно-динамического моделирования кинетических характеристик многозарядных тяжелых ионов в сильных электрических полях в растворах расплавленных солей. В рамках ионной модели вычислены коэффициенты диффузии и подвижности растворенных ионов и ионов растворителя при различных концентрациях и температурах. Проанализированы эффекты сильной неидеальности раствора и, в частности, структура первой и второй сольватных оболочек ионов с различными числами окисления. Оценена их стабильность и ее влияние на поведение ионов во внешнем электрическом поле, в т.ч. на возникновение эффекта отрицательной подвижности сольватированных ионов в расплавах солей.

Kinetic properties of heavy ions in highly non-ideal systems

E.S.Yakub

Odessa State Economic University, Odessa, Ukraine

(Abstract)

Kinetic characteristics of polyvalent actinide and lanthanide ions are of great importance in development of modern technology, including electrolytic separation of nuclear waste.

We present molecular dynamical simulation of kinetic characteristics of multiply charged heavy ions dissolved in molten salts in strong electric fields. Diffusion coefficients and mobilities of the solute and solvent ions are computed at different concentrations and temperatures within ionic model.

Effects of strong non-ideality including structure of the first and second solvation shell in different oxidation states of ions are analysed. Stability of solvation shells and their influence on behaviour of ions in external electric field, including effect of negative mobility of solvated ions in molten salts are estimated.