

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ РАСТВОРОВ ХЛОРИДОВ НАТРИЯ И КАЛЬЦИЯ MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF ION SPUTTERING OF THE SOLUTIONS OF SODIUM AND CALCIUM CHLORIDES

Сироткин Н.А., Титов В.А.

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, 153045, Россия, Иваново, ул. Академическая, 1, e-mail: alexsad8@yandex.ru

Методом молекулярной динамики исследован процесс ионного распыления водных растворов хлоридов натрия и кальция. Показано, что ионы растворенного вещества могут выходить в газовую фазу как в виде гидратированных ионов, так и в виде ионных пар в составе водных кластеров.

The ionic sputtering of sodium chloride and calcium chloride solutions was studied by classical molecular dynamics method. It is shown that the ions of the solute transferred into the gas phase both in the form of hydrated ions and in the form of ion pairs in water clusters.

В газовом разряде атмосферного давления с жидким катодом поверхность электролитного катода бомбардируется положительными ионами, что приводит к различным химическим и физическим процессам, как в жидкой, так и в газовой фазах. В тоже время бомбардировка поверхности приводит к переносу в газовую фазу компонентов раствора: растворителя и растворенного вещества.

Цель настоящей работы заключается в исследовании ионного распыления водных растворов хлоридов натрия и кальция 1-20 падающими ионами с начальной энергией 50-500 эВ методом классической молекулярной динамики, реализованным в программном пакете Gromacs по алгоритмам, описанным в работе [1]. Следует отметить, что в настоящей работе при моделировании учтено наличие электрического поля у поверхности катода. Моделирование показало, что в зависимости от числа и энергии бомбардирующих ионов меняется характер ионного распыления жидкого катода. При вкладываемой энергии 0,14-0,25 эВ/частица (13,5-24 кДж/моль) в газовую фазу переходят преимущественно молекулы воды. При достижении пороговой энергии (0,3 эВ/частица, 30 кДж/моль) в газовой фазе появляются не только молекулы воды, но и компоненты растворенного вещества, перенос которых происходит как в виде гидратированных катионов и анионов, так и в составе водных кластеров в виде ионных пар. Наличие электрического поля препятствует уносу гидратированных катионов в газовую фазу тем самым значения коэффициентов переноса для хлорид-ионов оказываются выше, чем для катионов натрия или кальция. Таким образом, результаты моделирования подтверждают установленное ранее экспериментально нарушение стехиометрии при переносе нелетучих компонентов жидкого катода [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №16-33-60061 мол_а_дк)

ЛИТЕРАТУРА

1. A.Yu. Nikiforov. *High Energy Chem.* **42** (2008) 235.
2. A.V. Khlyustova, N.A. Sirotkin, A.I. Maximov. *High Energy Chem.* **44** (2010) 75.