

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМЕННОГО РАСПЫЛЕНИЯ ЖИДКОГО КАТОДА¹

Сироткин Н.А., Гурина Д.Л.

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, gdl@isc-ras.ru

В газовых разрядах атмосферного давления с жидким катодом поверхность катода бомбардируется положительными ионами, которые вызывают протекание химических и физических процессов жидкой и газовой фазах. Бомбардировка поверхности приводит к переносу в газовую фазу компонентов раствора: растворителя и нелетучего растворенного вещества, что приводит к изменению физических свойств самой плазмы. В качестве меры эффективности переноса частиц используется коэффициент переноса – величина, равная числу частиц, переносимых из раствора в газовую фазу в расчете на один бомбардирующий ион.

Цель настоящей работы: методом классической молекулярной динамики, реализованным в программном пакете Gromacs, исследовать плазменное распыление водного раствора хлорида натрия 1-20 падающими ионами с начальной энергией 50-500 эВ.

Моделирование показало, что результат распыления качественно меняется с увеличением числа бомбардирующих поверхность ионов и их энергии. При вкладываемой энергии 0,14-0,25 эВ/частица (13,5-24 кДж/моль) в газовую фазу переходят преимущественно молекулы воды, но при увеличении числа бомбардирующих ионов (и/или их энергии) в газовой фазе появляются димеры, тримеры и более крупные кластеры 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.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 16-33-60061