Неравновесный перенос компонентов электролитного катода в плазму: эксперимент и молекулярно-динамическое моделирование

Н.А. Сироткин, В.А. Титов

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия, [tva@isc-ras.ru](mailto:tva@isc-ras.ru)

Свойства плазмы разряда атмосферного давления с жидким катодом (вода или растворы электролитов) зависят от состава раствора-катода, что обусловлено неравновесным переносом растворителя и растворенного вещества в газовую фазу под действием ионной бомбардировки. Этот процесс можно охарактеризовать коэффициентом переноса того или иного компонента – величиной, равной числу частиц, переносимых из раствора в газовую фазу в расчете на один ион, бомбардирующий катод. Коэффициенты переноса для воды составляют 50 – 500 частиц/ион, для катионов и анионов растворенных солей – от 10-3 до 1 частиц/ион в зависимости от состава раствора и условий эксперимента [1].

В настоящей работе приведены результаты экспериментального исследования и моделирования методом молекулярной динамики процессов переноса компонентов раствора, являющегося катодом разряда атмосферного давления в воздухе. Эксперименты выполнены с растворами хлоридов Na, Mg, Ca, Sr, Ba (*с*=0,01-0,5 моль/л) при токе разряда *i*=10-70 мА. Методом классической молекулярной динамики, реализованном в программном пакете Gromacs, исследовано распыление водного раствора хлорида натрия под действием 1 – 20 ионов с начальной энергией 50–500 эВ. Алгоритмы моделирования описаны в [2].

Измеренные значения катодного падения потенциала для разных растворов-катодов составляли 500 – 600 В и слабо зависели от тока разряда. Состав раствора-катода сказывался на напряженности электрического поля в плазме, которая изменялась в интервале 500–1200 В/см и уменьшалась с ростом тока разряда при любых исследованных составах катодов.

Имеются пороговые значения тока, при которых появляются линии излучения атомов металлов в спектре разряда. Эти пороговые значения зависят от массы атома металла и концентрации раствора. При достижении порогового тока резко уменьшается плотность тока в катодной области разряда.

Экспериментально измеренные коэффициенты переноса для раствора хлорида натрия сопоставлены с результатами моделирования методом молекулярной динамики (таблица 1). Согласно результатам моделирования, под действием ионной бомбардировки происходит перенос в газовую фазу как частиц растворителя, так и ионов растворенного вещества. Ионы растворенной соли распыляются как в виде ионных пар в составе водных кластеров, так и в виде сольватированных катионов и анионов. Соотношение между различными формами зависит от плотности потока ионов и их энергии.

Таблица 1. Коэффициенты переноса ионов натрия и хлора.

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Ион | Расчет | | | Эксперимент\* | | |
| 8 ионов | 9 ионов | 13 ионов (E0=200 эВ) | *i*=30 мА | *i*=40 мА | *i*=50 мА |
| (E0=300 эВ) | |
| Na+ | 0,250 | 0,333 | 0,307 | 0,019±0,005 | 0,029±0,009 | 0,036±0,012 |
| Clˉ | 0,250 | 0,333 | 0,307 | 0,258±0,025 | 0,334±0,025 | 0,395±0,035 |

\* Концентрация раствора NaCl – 0,5 моль/л, катодное падение потенциала U=500±10 В

Литература

1. Khlyustova A. V., Sirotkin N. A., Maximov A. I. High Energy Chem, 2010, v. 44, pp. 75-77
2. Domingues, H. and Berkowitz, M.L., J. Phys. Chem., B, 2000, vol. 104, p. 5302.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №12-03-31297.*