

Поведение смешанных хлоридов на границе раздела системы н-додекан/вода

Смирнов О.М.^{1,®} и Писарев В.В.^{1,2}

¹ Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, Ижорская ул., 13, корп. 2, Москва, 125412, Россия

² Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Мясницкая 20, Москва, 101000, Россия

® smirnov.om@phystech.edu

Неполяризуемые модели водных растворов солей с масштабированными зарядами ионов успешно воспроизводят линейное увеличение избыточного межфазного натяжения с ростом молярности для растворов индивидуальных хлоридов. Однако большинство природных и технологических процессов включает сложные многокомпонентные рассолы. В данной работе методом молекулярной динамики с использованием силового поля Madrid-2019 [1] и модели TraPPE-UA [2] было исследовано влияние состава бинарной смеси NaCl–CaCl₂ на избыточное межфазное натяжение на границе раздела между н-додеканом и водным раствором. Целью работы является проверка аддитивности вкладов отдельных ионов и выявление специфических эффектов, обусловленных взаимодействием моделируемых ионов. Исследована адсорбция катионов и анионов на межфазной границе, а также её связь с избыточным межфазным натяжением.

[1] Zerón I M, Abascal J L F and Vega C 2019 *The Journal of Chemical Physics* **151** 134504

[2] Martin M G and Siepmann J I 1998 *The Journal of Physical Chemistry B* **102** 2569–2577