

**СТАТИСТИКО-ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ
ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ «РАСПЛАВ – КРИСТАЛЛ»
НА ДИАГРАММАХ СОСТОЯНИЯ ФТОРИДНЫХ СМЕСЕЙ
ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ**

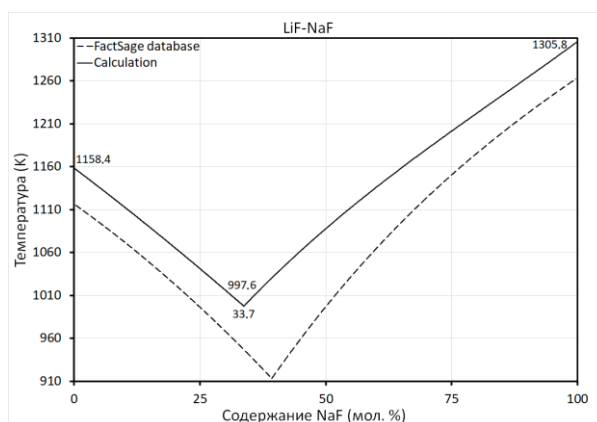
Давыдов А.Г., Ткачев Н.К.

Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН
620137, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

В последние десятилетия большое внимание сосредоточено на использовании фторидных расплавов при проектировании жидкосольевых ядерных реакторов, переработке отработавшего ядерного топлива, развитии солнечной энергетики. В вопросах, связанных с технологией процессов, первоочередными являются сведения о термодинамической стабильности и границах существования фаз.

В докладе будет представлена статистико-термодинамическая модель для расчета равновесий между расплавом и кристаллом в солевых смесях. Вычисление равновесий «расплав – кристалл» осуществляется в работе посредством приравнивания химических потенциалов компонентов в обеих фазах. При этом, свободная энергия жидкой фазы включает стандартный вклад идеальной газовой смеси, твердосферное отталкивание в приближении MCSL, кулоновское взаимодействие в приближении MSA, а также дополнительный заряд-дипольный вклад, полученный в рамках термодинамической теории возмущений. Свободная энергия ионных кристаллов вычисляется в соответствие с уравнением Борна-Майера при учете колебательного вклада по модели Дебая.

Также в докладе будет проведено сопоставление результатов расчетов кривых ликвидус на фазовых диаграммах фторидных смесей щелочных металлов с литературными данными. На рисунке, для примера, дано сопоставление расчетных кривых ликвидус с данными FactSage для эвтектической смеси LiF–NaF.



Ликвидус на фазовой диаграмме эвтектической смеси LiF–NaF

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-90180.