

**СТАТИСТИКО-ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ
УЧЕТА ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ВКЛАДА В СВОБОДНУЮ ЭНЕРГИЮ
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ЖИДКОСОЛЕВЫХ СИСТЕМ
ТИПА FLINAK**

Давыдов А.Г., Ткачев Н.К.

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

Энергия взаимодействия ионов в расплавленном электролите включает в себя силы, которые можно классифицировать по числу частиц на две группы. Первая группа – это парные взаимодействия: отталкивание на коротких расстояниях, дисперсионные и кулоновские взаимодействия. Более трудной задачей является рассмотрение второй группы взаимодействий, а именно, поляризационных. Заряд иона индуцирует дипольные моменты на соседних ионах, следовательно, они будут не только взаимодействовать друг с другом, но и индуцировать дипольные моменты на других ионах. Существующие подходы к учету поляризационных взаимодействий в расплавленных электролитах построены на основе методов молекулярно-динамического и *ab initio* моделирования. При этом статистическая теория для учета поляризационных взаимодействий в солевых расплавах посредством термодинамической теории возмущений не была разработана.

Поскольку эффекты поляризации должны вносить меньший вклад в энергию расплава по сравнению с кулоновским взаимодействием, учет поляризационных взаимодействий учитывается в работе с помощью термодинамической теории возмущений. В рамках данного подхода становится возможным учет более сложных поляризационных взаимодействий на основе простой модели заряженных твердых сфер, имеющей аналитическое решение в рамках среднесферического приближения. Выражение для ион-дипольной части свободной энергии расплавов по методу теории возмущений можно представить в виде:

$$F_{pol} = 2\pi\rho \sum_{i,j} x_i x_j \int_0^\infty \phi_{ij}^{pol}(R) \cdot g_{ij}^{chs}(R) \cdot R^2 dR$$

где $g_{ij}^{chs}(R)$ – парные корреляционные функции системы сравнения заряженных твердых сфер, а $\phi_{ij}^{pol}(R)$ – дополнительный поляризационный вклад в парный потенциал. Отметим, что с точки зрения уменьшения потребности в вычислительных ресурсах наиболее целесообразно проводить вычисления в пространстве Фурье-образов, перейдя от парных функций распределения к Фурье-образам структурных факторов. Данная модель будет подробно описана в докладе. Кроме того, будет представлено сопоставление экспериментальных и расчетных термодинамических характеристик некоторых жидкосолевых смесей.

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