

## ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА ТЕРМОДИНАМИКУ И ЛИКВИДУС ГАЛОГЕНИДНЫХ РАСПЛАВОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

*Смолярчук Е.В.<sup>(1)</sup>, Давыдов А.Г.<sup>(2)</sup>*

<sup>(1)</sup> Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

<sup>(2)</sup> Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН  
620137, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

Повышенное внимание к разработке теоретических методов описания и даже предсказания равновесий на фазовых диаграммах обусловлено потребностью большинства технологических процессов в информации о границах стабильности существования фаз. В зависимости от изучаемых систем, будь то молекулярные жидкости или ионные системы, существуют несколько основных подходов к описанию фазовых равновесий. Если подробнее говорить о расплавленных электролитах, то можно выделить несколько различных подходов к этой проблеме.

Наиболее распространенный среди них – термодинамическое моделирование (CALPHAD, PANDAT и др.), – способен на основе полуэмпирических моделей описывать системы более низкого порядка (бинарные), а затем на базе систем низшего порядка прогнозировать сложные системы более высокого порядка (например, тройные взаимные). Важно отметить, что полуэмпирический подход приводит к большому количеству параметров, определяемых из эксперимента, например, стандартные свободные энергии Гиббса чистых солей, координационные числа и т.д. Все это сильно снижает фундаментальную ценность использованного подхода. С развитием вычислительных возможностей компьютерной техники в XXI стали более интенсивно развиваться первопринципные методы описания фазовых диаграмм (*ab initio*), методы, основанные на молекулярной динамике, и методы Монте-Карло, а также комбинированные подходы указанных методов.

До сих пор теоретические подходы к изучению диаграмм плавкости солевых смесей имели в основном полуэмпирический, первопринципный (в интеграции с Монте-Карло методом) или молекулярно-динамический характер, в то время как микроскопическая теория, основанная на статистико-термодинамических моделях, не была развита для расчета поверхности ликвидус даже в бинарных смесях галогенидов щелочных металлов.

В настоящем докладе будет представлена статистико-термодинамическая модель для описания ликвидуса и термодинамических характеристик галогенидов цезия при учете поляризационных взаимодействий ионов в расплаве.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-01234.*