

# ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛАВЛЕНИЯ ГАЛОГЕНИДОВ НАТРИЯ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

*Закирьянов Д.О.,\* Кобелев М.А., Ткачѳв Н.К.*

*ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

*\*dmitry.usu.ph@yandex.ru*

Методом молекулярной динамики проведено теоретическое исследование характеристик фазовых переходов плавления и кристаллизации в классических ионных системах. Рассмотрен аналог примитивной модели электролита, с одинаковыми радиусами и противоположными по знаку зарядами, с помощью которой возможно проследить роль борн-майеровского отталкивания на температуру, энтропию и скачок плотности при плавлении. Основное внимание будет сфокусировано на описании характеристик фазового перехода плавление–кристаллизация в зависимости от изменения параметров парного потенциала типа Борна–Майера. Процесс плавления базовой кристаллической ячейки, содержащей 512 частиц, моделируется при использовании NPT-ансамбля, с шагом 0,005 пс, общим количеством шагов равным  $4 \cdot 10^6$ , что по нашему мнению является достаточным для достижения равновесного состояния системы. Результаты моделирования показывают, что предэкспоненциальный фактор борновского отталкивания влияет только на плотность рассматриваемой системы, при этом температура фазового перехода остаѳтся постоянной, тогда как уменьшение характерной длины парного потенциала приводит к понижению температуры плавления модельной системы. Проведены оценки влияния вакансий на температуру плавления на примере галогенидов натрия. Предложенный теоретический подход к описанию фазового перехода жидкость–тѳвердое тело применен к галогенидам натрия. В частности, для хлорида натрия, имеющему экспериментальную температуру плавления 1074 К, показано, что моделируемый кристалл перегревается примерно на 50 К выше температуры плавления. Рассчитанная температура и теплота плавления равны, соответственно,  $1112 \pm 12$  К и 38,4 кДж/моль, а скачок плотности составил 0,44 г/см<sup>3</sup>. В докладе будет представлено сопоставление рассчитанных и экспериментальных характеристик плавления для всех галогенидов натрия.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-03-00606).