

ИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ СЖИМАЕМОСТЬ БИНАРНЫХ РАСПЛАВЛЕННЫХ СМЕСЕЙ ГАЛОГЕНИДОВ КАЛИЯ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

*Татаринов А.С.,¹ Кобелев М.А.,*² Степанов В.П.²*

*¹УрФУ, Екатеринбург, Россия, ²ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург,
Россия*

**coulomb76@mail.ru*

Методом классической молекулярной динамики проведён расчёт изотермической сжимаемости бинарных расплавленных галогенидов калия (KBr-KI, KCl-KI, KF-KI) во всей области концентраций при температуре 1200К. Базовая кубическая ячейка, содержащая 3456 частиц, моделировалась в NVT-ансамбле при наложении периодических граничных условий. Взаимодействие частиц в ячейке описывалось парным потенциалом типа Борна-Майера-Хаггинса в приближении Фуми-Тоси. Кулоновское взаимодействие учитывалось по методу Эвальда. Объём базовой ячейки для бинарных смесей рассчитывался из данных по плотности индивидуальных солей в приближении аддитивности мольных объёмов чистых компонентов.

В данной работе изотермическая сжимаемость рассчитывалась по стандартному термодинамическому соотношению через длинноволновой предел структурного фактора типа плотность-плотность.

Результаты моделирования показывают, что в рамках описания бинарных расплавленных смесей посредством модели жёстких ионов удаётся воспроизвести наблюдаемые в эксперименте закономерности изменения изотермической сжимаемости в зависимости от концентрации. А именно, увеличение положительных отклонений изотермической сжимаемости от аддитивности при замене аниона второго компонента в ряду Br – Cl – F.

Анализ структурных характеристик смесей в зависимости от концентрации компонентов демонстрирует, что в системе KF-KI при добавлении фторид-иона существенно меняется локальное окружение катиона калия. В объёме бинарной расплавленной смеси KF-KI формируются области преимущественно содержащие катион-анионные группировки, соответствующие индивидуальным компонентам. В противоположность этому в бинарных смесях KBr-KI и KCl-KI наблюдается закономерное изменение состава ближайшего катион-анионного окружения при добавлении второго компонента.