

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СОЛЕВЫХ РАСПЛАВОВ ПРИ УЧЕТЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ

Давыдов А.Г., Ткачев Н.К.*

ИБТЭ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**A.Davydov@ihte.uran.ru*

Изучение термодинамических характеристик и фазовых равновесий в различных системах является важнейшей частью большинства исследований, связанных с материаловедением, поскольку при рассмотрении тех или иных свойств материала в первую очередь необходимо обладать информацией о границах устойчивости каждой фазы в системе. Существуют различные теоретические подходы к решению этой проблемы, основанные на методах *ab initio*, молекулярного моделирования, термодинамического моделирования и их комбинации, в то время как статистико-термодинамическая теория применительно к этим задачам менее разработана.

Одним из направлений в этой области является исследование термодинамических свойств и межфазных границ в солевых расплавах. Поэтому теоретическое описание различных эффектов, наблюдаемых в этих системах, является важной задачей. Данное исследование связано с изучением влияния поляризационных эффектов между ионами на термодинамические свойства и процесс плавления галогенидных расплавов щелочных металлов. Трудность здесь заключается в том, что поляризационные эффекты всегда возникают не только между соседними частицами, а также в последующих координационных сферах. Поэтому для рассмотрения поляризационных эффектов необходимо вводить диэлектрическую постоянную.

В сообщении будет представлена статистико-термодинамическая модель учета поляризационного вклада в парный потенциал взаимодействия ионов солевого расплава. Такая модель реализована при помощи термодинамической теории возмущений, где эталонной системой является потенциал заряженных твердых сфер. Таким образом, более слабый эффект поляризации ионов может рассматриваться как возмущение.

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