

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Химия. Биология. Экология. 2024. Т. 24, вып. 4. С. 380–391

Izvestiya of Saratov University. Chemistry. Biology. Ecology, 2024, vol. 24, iss. 4, pp. 380–391

https://doi.org/10.18500/1816-9775-2024-24-4-380-391, EDN: ZAMIKE

Научная статья УДК 541.1:544.012

Расчет удельной электропроводности расплавов смесей LiF+NaF

О. В. Лаврентьева, И. К. Гаркушин [™], А. С. Никитина

Самарский государственный технический университет, Россия, 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244

Лаврентьева Ольга Владимировна, кандидат химических наук, доцент кафедры «Общая и неорганическая химия», olav1965olga@ yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-8110-2495

Гаркушин Иван Кириллович, доктор химических наук, профессор кафедры «Общая и неорганическая химия», gik49@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-6038-8519

Никитина Алина Сергеевна, магистрант, nikitina.ke@yandex.ru

Аннотация. Представлен расчет удельной электропроводности расплавов смесей фторидов лития и натрия. Интерес к расплавам системы LiF–NaF определяется их практическим значением. Расплавы смесей LiF+NaF применяются в теплоаккумулирующих составах, в металлургии, входят в состав различных многокомпонентных систем. Приведен расчет удельной электрической проводимости изоконцентрационным, изотермическим и интерполяционным методами для расплавов смесей LiF+NaF различного состава по известным справочным данным для интервала температур 1020...1340 К. Выполнен расчет для эвтектического состава. Полученные в результате аналитические уравнения использованы для описания и расчета удельной электропроводности эвтектической смеси для температур на 5°, 10°, 50°, 75°, 100° выше ликвидуса. Изоконцентрационные зависимости описываются уравнением прямой. Удельная электропроводность расплава эвтектической смеси рассчитана на изотермах интерполированием для изоконцентрационных зависимостей доэвтектических и заэвтектических смесей. Изотермы удельной электропроводности (1020...1340 K) расплавов в зависимости от содержания компонентов LiF и NaF описаны полиномом третьей степени, в котором коэффициенты в зависимости от температуры изменяются линейно. Проведено сравнение значений удельной электрической проводимости »(LiF+NaF), рассчитанных по полученным уравнениям. Описание »(LiF+NaF) изоконцентрационным и изотермическим методами показывает удовлетворительную сходимость результатов расчета и позволяет рассчитать удельную электропроводность расплавов смесей LiF+NaF любого заданного состава, включая эвтектический.

Ключевые слова: удельная электропроводность, расплавы фторидов лития и натрия, *Т-х-*диаграмма, ликвидус, температуры плавления, аналитическое описание, графические зависимости, прогнозирование

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FSSE-2023-0003) в рамках государственного задания Самарского государственного технического университета.

Для цитирования: Лаврентьева О. В., Гаркушин И. К., Никитина А. С. Расчет удельной электропроводности расплавов смесей LiF+NaF // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Химия. Биология. Экология. 2024. Т. 24, вып. 4. С. 380–391. https://doi.org/10.18500/1816-9775-2024-24-4-380-391, EDN: ZAMIKE

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (СС-ВУ 4.0)

Article

Methods for calculating specific electrical conductivity of the LiF+NaF mixtures melt

O. V. Lavrenteva, I. K. Garkushin [™], A. S. Nikitina

Samara State Technical University, 244 Molodogvardeyskaya St., Samara 443100, Russia

Olga V. Lavrenteva, olav1965olga@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-8110-2495

Ivan K. Garkushin, gik49@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-6038-8519

Alina S. Nikitina, nikitina.ke@yandex.ru

Abstract. The calculation of the specific electrical conductivity of lithium and sodium fluorides mixtures melts is presented. The linterest in the LiF–NaF system melts is determined by their practical significance. Melts of LiF+NaF mixtures are used in heat-storing compositions and in metalurgy. They are part of various multicomponent systems. The specific electrical conductivity calculation by isoconcentration, isothermal and interpolation methods is given for LiF+NaF mixtures melts of various compositions using known reference data for the temperature range 1020...1340 K. A calculation has been performed for the eutectic composition. The resulting analytical equations have been used to describe and calculate the



specific electrical conductivity of the eutectic mixture for temperatures 5° , 10° , 50° , 75° , 100° above the liquidus. The specific electrical conductivity of the eutectic mixture melt is calculated on isotherms by interpolation for the isoconcentration dependences of hypoeutectic and hypereutectic mixtures. Isotherms of electrical conductivity (1020...1340 K) of melts depending on the content of LiF and NaF components are described by a third-degree polynomial. Depending on the temperature, the coefficients in the resulting equation change linearly. A comparison has been made of the values of specific electrical conductivity $\varkappa(\text{LiF+NaF})$, calculated from the obtained equations. The description of $\varkappa(\text{LiF+NaF})$ by isoconcentration and isothermal methods has showed satisfactory convergence of calculation results and makes it possible to calculate the specific electrical conductivity of LiF+NaF mixtures melts of any given composition, including eutectic.

Keywords: specific electrical conductivity, melts of lithium and sodium fluorides, *T-x*-diagram, liquidus, melting temperature, eutectic, analytical description, graphical dependencies, calculation, forecasting

Acknowledgments. The work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme No. FSSE-2023-0003) as part of the state task of the Samara State Technical University.

For citation: Lavrenteva O. V., Garkushin I. K., Nikitina A. S. Methods for calculating specific electrical conductivity of the LiF+NaF mixtures melt. *Izvestiya of Saratov University. Chemistry. Biology. Ecology*, 2024, vol. 24, iss. 4, pp. 380–391 (in Russian). https://doi.org/10.18500/1816-9775-2024-24-4-380-391, EDN: ZAMIKE

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC-BY 4.0)

Введение

В современной технике и технологии значительное количество процессов связано с использованием систем на основе галогенидов щелочных (ЩМ) и щелочноземельных (ЩЗМ) металлов. Эти системы находят широкое применение для оптимизации процессов аккумулирования тепловой энергии [1–8]; создания перспективных флюсов для сварки и пайки металлов [7, 8]; разработки сред для электролитического выделения металлов и расплавляемых электролитов химических источников тока (ХИТ) [1, 9-11]; получения расплавов и растворителей для ядерной энергетики [6, 12]. Особое значение традиционно имеют расплавленные смеси на основе солей лития, в том числе галогенидов. Однако в последнее время снова возрастает интерес к солевым расплавам, содержащим галогениды натрия. Фторидные смеси на основе Li и Na интересны как в самостоятельном виде, так и в смеси с другими галогенидами. Возрождается интерес к реакторам с расплавами солей, в которых используются хлоридные и фторидные эвтектики [13, 14].

Важными характеристиками электролитов и теплоаккумулирующих веществ являются температуры плавления, плотность, удельная электропроводность, теплопроводность и др. В литературе в основном приводятся данные по свойствам расплавов смесей при сравнительно высоких температурах, а для эвтектических смесей данные зачастую отсутствуют [15–22]. Авторы статей [13, 14, 23, 24] отмечают необходимость получения более точных сведений о возможностях солей, в том числе по теплофизическим свойствам теплоносителей на основе расплавов галогенидов. Однако экспери-

ментальные исследования сопряжены с рядом трудностей, обусловленных, прежде всего, коррозионной агрессивностью и токсичностью исходных объектов [14, 24-26]. Получение недостающих данных возможно благодаря использованию классических методов расчета [27, 28], прогнозированию и моделированию физико-химических свойств элементов, простых веществ, соединений и их смесей [25, 29, 30]. Применение приближенных математических уравнений тесно связано с компьютерным прогнозированием [25, 26, 29-33]. Представленная работа посвящена описанию и расчету удельной электропроводимости и расплавов смесей LiF+NaF. Данная система находит применение как самостоятельная двойная, а также как составляющая тройных, четверных и более сложных систем [7–14, 23–25].

Материалы и методы

Выбор приближенных математических уравнений и аналитическое описание проводились с помощью пакетов программ Table Curve 2D производства фирмы Jandel scientificTM и Microsoft Exel с соблюдением требования: $R \rightarrow \max$, $\sigma \rightarrow \min$, где R -коэффициент корреляции, $\sigma -$ среднеквадратичное отклонение [33–37]. Для расчета и прогнозирования применен метод сравнительного расчета М. Х. Карапетьянца [25].

В качестве исходных данных использованы числовые значения удельной электропроводности, приведенные в [17, 20, 21] (табл. 1) и *Т-х-*диаграмма системы LiF–NaF с указанием температур плавления составов (рис. 1) (в градусах Кельвина и Цельсия) в интервале температур 1020...1340 К [17, 18].

381



Таблица 1 / Table 1 Исходные значения удельной электропроводности (Ом⁻¹см⁻¹) расплавов смесей LiF+NaF [17] Initial values of specific electrical conductivity (Ohm⁻¹cm⁻¹) of mixtures melt [17]

77: 17	Содержание LiF, % мол. / LiF content, % mol.								
T, K	0	20	40	50	62	70	85	100	
1020						5.81			
1030					5.54	5.87			
1040					5.59	5.93			
1050					5.65	5.99			
1060					5.70	6.05	6.97		
1070				5.40	5.76	6.11	7.04		
1080				5.45	5.82	6.17	7.11		
1090				5.51	5.87	6.24	7.18		
1100				5.57	5.93	6.30	7.25		
1110				5.62	5.98	6.36	7.32		
1120				5.68	6.04	6.42	7.39		
1130				5.74	6.09	6.48	7.46		
1140			5.26	5.79	6.15	6.54	7.53		
1150			5.30	5.85	6.20	6.60	7.60	9.10	
1160			5.34	5.90	6.26	6.66	7.67	9.16	
1170			5.39	5.96	6.32	6.72	7.74	9.22	
1180		5.21	5.43	6.02	6.37	6.79	7.81	9.27	
1190		5.26	5.48	6.07	6.43	6.85	7.88	9.33	
1200		5.31	5.52	6.13	6.48	6.91	7.95	9.39	
1210		5.37	5.56	6.19	6.54	6.97	8.02	9.45	
1220		5.42	5.61	6.24	6.59	7.03	8.09	9.51	
1230		5.47	5.65	6.30	6.65	7.09	8.16	9.57	
1240		5.52	5.69	6.36	6.70	7.15	8.22	9.62	
1250		5.57	5.74	6.41	6.76	7.21	8.29	9.68	
1260		5.62	5.78	6.47	6.81	7.27	8.36	9.74	
1270		5.68	5.82	6.53	6.87	7.34	8.43	9.80	
1280		5.73	5.87	6.58	6.93	7.40	8.50	9.86	
1290		5.77	5.91	6.64	6.98	7.46	8.57	9.92	
1300		5.83	5.95	6.70	7.04	7.52	8.64	9.97	
1310	5.33	5.88	6.00	6.75	7.09	7.58	8.71	10.03	
1320	5.39	5.93	6.04	6.81	7.15	7.64	8.78	10.09	
1330	5.44	5.99	6.08	6.87	7.20	7.70	8.85	10.15	
1340	5.50	6.04	6.13	6.92	7.26	7.76	8.92	10.21	

Из табл. 1 видно, что часть данных отсутствует, в том числе при температурах ниже 1020 К.

На рис. 2 показаны изоконцентрационные зависимости. Во всем интервале концентраций LiF зависимость удельной электропроводности расплавов смеси LiF+NaF от температуры описывается прямой

$$\kappa = a + bT,$$

где κ — удельная электропроводность, $\mathrm{Om^{-1}cm^{-1}}$; a и b — коэффициенты; T — температура, K.

Результаты описания и характеристики уравнения представлены в табл. 2.

В табл. З приведены рассчитанные с учетом коэффициентов табл. 2 числовые значения удельной электропроводности, дополняющие справочные данные (см. табл. 1) в соответствии с *Т-х-*диаграммой системы LiF–NaF (см. рис. 1). Удельная электропроводность расплава эвтектической смеси (61 % мол. LiF, 39 % мол. NaF, 649 °C) рассчитана методом линейного интерполирования для изоконцентрационных зависимостей.



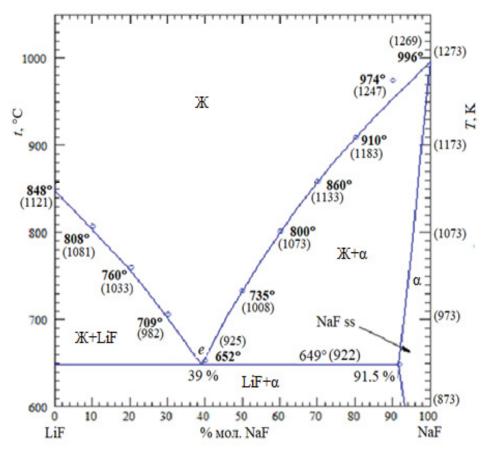
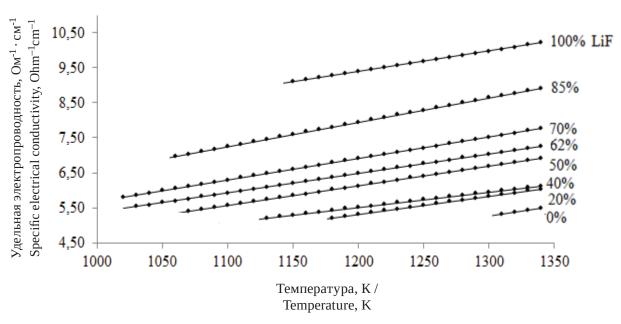


Рис. 1. T-x-диаграмма системы LiF-NaF с указанием температур плавления составов [17, 18]

Fig. 1. *T-x*-diagram of the LiF–NaF system indicating the melting points of the compositions [17, 18]



Puc. 2. Изоконцентрационные зависимости Fig. 2. Isoconcentration dependencies



Tаблица 2 / Table 2 Результаты аналитического описания зависимости $\varkappa(\text{LiF+NaF})$ от температуры T The analytical description results of the $\varkappa(\text{LiF+NaF})$ dependence on temperature T

Содержание LiF,	Коэффициент	Среднеквадратичное			l
% мол. /	корреляции R /	отклонение σ, Ом ⁻¹ см ⁻¹ / Square	а	$b.10^{3}$	l
LiF content, % mol.	Correlation coefficient R	root deviation σ, Ohm ⁻¹ cm ⁻¹			Į
0	0.99936	0.002	-2.0 ± 0.8	5.60±0.06	l
20	0.99990	0.004	-0.89 ± 0.05	5.17±0.04	l
40	0.99994	0.003	0.30 ± 0.03	4.352±0.021	ı
50	0.99998	0.003	-0.65±0.02	5.60±0.014	
62	0.99998	0.003	-0.18±0.01	5.551±0.011	1
70	0.99999	0.003	-0.40 ± 0.01	6.11±0.01	
85	0.99999	0.000	-0.40 ± 0.02	6.951±0.012	l
100	0.99997	0.003	2.40 ± 0.03	5.831±0.024	ı

Таблица 3 / Table 3

Числовые значения удельной электропроводности (Ом⁻¹·см⁻¹) расплавов смесей LiF+NaF, полученные изоконцентрационным методом Numerical values of specific electrical conductivity (Ohm⁻¹cm⁻¹) of LiF+NaF mixtures melts, obtained by the isoconcentration method

T. I.	Содержание LiF, % мол. / LiF content, % mol.							
T, K	0	40	50	61 (e)	62	85	100	
1020			5.11	5.44	5.48			
1030			5.17	5.49				
1040			5.23	5.54		6.83		
1050		4.87	5.28	5.60		6.90		
1060		4.91	5.34	5.66				
1070		4.95		5.72				
1080		5.00		5.77				
1090		5.04		5.83				
1100		5.08		5.89				
1110		5.13		5.94				
1120		5.17		6.00			8.92	
1130		5.21		6.05			8.98	
1140				6.11			9.04	
1150				6.16				
1160				6.22				
1170				6.28				
1180				6.33				
1190	4.66			6.39				
1200	4.72			6.44				
1210	4.77			6.50				
1220	4.83			6.55				
1230	4.88			6.61				
1240	4.94			6.66				
1250	5.00			6.72				
1260	5.05			6.77				
1270	5.11			6.83				
1280	5.16			6.89				
1290	5.22			6.94				
1300	5.28			7.00				
1310				7.05				
1320				7.11				
1330				7.16				
1340				7.22				



Уравнение зависимости удельной электропроводности эвтектической смеси, полученное по данным табл. 3, имеет вид:

$$\kappa = (-0.211 \pm 0.013) + (5.552 \pm 0.011) \cdot 10^{-3} \cdot T$$
($R = 0.99997$; $\sigma = 0.003 \text{ Om}^{-1}\text{cm}^{-1}$).

По полученным уравнениям для изоконцентрационных зависимостей рассчитана удельная

электрическая проводимость расплавов смесей системы LiF–NaF соответствующего состава (см. рис. 2) в интервале температур ($T_{\Pi\Pi} + n$) ($n = 5^{\circ}$, 10° , 50° , 75° , 100° выше $T_{\Pi\Pi}$, отвечающих ликвидусу), включая расплав эвтектической смеси. Результаты расчета представлены в табл. 4.

Таблица 4 / Table 4

Результаты расчета κ расплавов смесей LiF+NaF в интервале температур ($T_{\rm пл}$ + n) ($n=5^{\circ}$, 10° , 50° , 75° , 100° выше $T_{\rm пл}$, отвечающих ликвидусу)

Results of calculating κ of LiF+NaF mixtures melts in the temperature range ($T_{melt} + n$) ($n = 5^{\circ}$, 10° , 50° , 75° , 100° above T_{melt} , corresponding to liquidus)

n,°	Содержание LiF, % мол. / LiF content, % mol.					
	50	61 (e)	62	70	85	
5		3.41	3.48			
10		3.44	3.51			
50	3.79	3.66	3.73	4.21		
75	3.93	3.80	3.87	4.37		
100	4.07	3.94	4.01	4.52	6.76	

При переходе к реальным температурам в интервале $(T_{\Pi\Pi} + n)$ $(n = 5^{\circ}, 10^{\circ}, 50^{\circ}, 75^{\circ}, 100^{\circ})$ выше $T_{\Pi\Pi}$, отвечающих ликвидусу) отмечается удовлетворительная согласованность полученных расчетом числовых значений удельной электропроводности с известными справочными значениями (см. табл. 1, 3).

Кроме описания удельной электропроводности расплавов смесей LiF+NaF изо-

концентрационным методом проведено аналитическое описание взаимосвязи удельной электропроводности расплавов смеси LiF–NaF и содержания фторида лития в смеси изотермическим методом по исходным справочным данным (см. табл. 1). Справочные данные позволяют корректно провести описание и только в интервале температур 1180–1340 К (рис. 3).

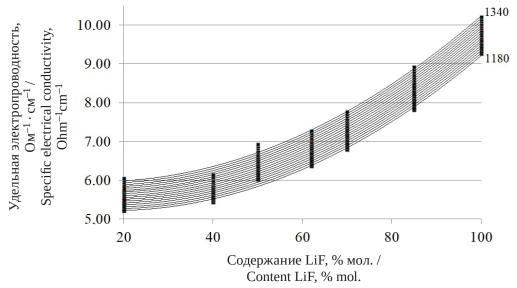


Рис. 3. Графические зависимости удельной электропроводности расплавов смесей LiF+NaF от содержания LiF в интервале температур 1180...1340 К

Fig. 3. Graphical dependences of the specific electrical conductivity of LiF+NaF mixture melts on the LiF content in the temperature range 1180...1340 K



Анализ изотерм удельной электропроводности (см. рис. 3) показал, что в зависимости от содержания LiF они описываются уравнением

$$\varkappa = a + bx^2$$

где x — содержание LiF, % мол. Средний коэффициент корреляции составил 0,9952; среднеквадратичное отклонение 0,1309 Ом $^{-1}$ см $^{-1}$.

Коэффициенты a, b меняются линейно в зависимости от температуры (рис. 4):

$$a = (-1.5 \pm 0.4) + (5.3 \pm 0.4) \cdot 10^{-3} \cdot T$$
 $R = 0.9907$;
 $b \cdot 10^4 = (1.9 \pm 0.2) + (2.0 \pm 0.2) \cdot 10^{-3} \cdot T$ $R = 0.9855$.

В табл. 5 приведены значения коэффициентов a и b в уравнении зависимости удельной электропроводности расплавов смесей LiF+NaF от содержания LiF $\kappa = a + bx^2$ в интервале температур 1080...1340 K.

Полученные зависимости позволяют рассчитать коэффициенты для различных температур и затем вычислить числовое значение удельной электропроводности для любых заданных концентраций LiF в расплаве смесей LiF+NaF, в том числе не входящих в исходные (справочные) данные.

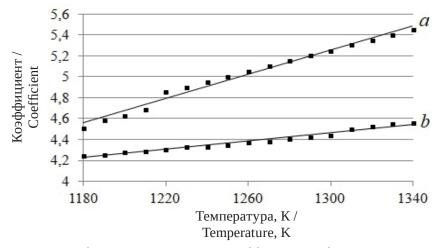


Рис. 4. Графические зависимости для коэффициентов a,b от температуры Fig.4. Graphic dependences for coefficients a,b on temperature

Таблица 5 / Table 5

Коэффициенты *a, b* в уравнении зависимости удельной электропроводности расплавов смесей LiF+NaF от содержания LiF в интервале температур 1020...1340 K Coefficients *a, b* in the equation for the dependence of the specific electrical conductivity of melts of LiF+NaF mixtures on the LiF content in the temperature range 1020...1340 K

T	а	$b \cdot 10^4$
1180	4.9±0.3	4.2±0.5
1190	4.9±0.3	4.3±0.5
1200	5.0±0.3	4.3±0.5
1210	5.0±0.3	4.3±0.5
1220	5.1±0.3	4.3±0.5
1230	5.1±0.3	4.3±0.5
1240	5.2±0.3	4.3±0.5
1250	5.2±0.3	4.4±0.5
1260	5.2±0.3	4.4±0.5
1270	5.3±0.3	4.4±0.5
1280	5.4±0.3	4.4±0.5
1290	5.4±0.3	4.4±0.5
1300	5.4±0.3	4.4±0.5
1310	5.4±0.2	4.5±0.4
1320	5.5±0.2	4.5±0.5
1330	5.6±0.2	4.6±0.5
1340	5.6±0.2	4.6±0.4



В табл. 6 приведены значения удельной электропроводности расплавов смесей LiF+NaF для интервала температур 1020–1170 К и содержания фторида лития 40, 50, 62, 85,

100% мол., рассчитанные изотермическим методом по уравнению $\varkappa = a + bx^2$ (x – содержание LiF) с предварительным расчетом коэффициентов a и b.

Таблица 6 / Table 6

Значения удельной электропроводности (Ом⁻¹см⁻¹) расплавов смесей LiF+NaF, рассчитанные изотермическим методом Values of specific electrical conductivity (Ohm⁻¹cm⁻¹) of mixtures melt calculated by the isothermal method

TV	Содержание LiF, % мол. / LiF content, % mol.							
T, K	40	50	62	70	85	100		
1020				5.86				
1030			5.51	5.92				
1040			5.57	5.98				
1050			5.63	6.05				
1060			5.69	6.11	7.04			
1070		5.21	5.75	6.17	7.11			
1080		5.27	5.81	6.24	7.17			
1090		5.33	5.87	6.30	7.24			
1100		5.39	5.93	6.36	7.31			
1110		5.45	6.00	6.43	7.38			
1120		5.50	6.06	6.49	7.44			
1130		5.56	6.12	6.55	7.51			
1140	5.25	5.62	6.18	6.62	7.58			
1150	5.30	5.68	6.24	6.68	7.65	8.80		
1160	5.36	5.74	6.30	6.74	7.72	8.88		
1170	5.42	5.80	6.36	6.81	7.78	8.95		

В сравнении со справочными данными (см. табл. 1) средняя относительная погрешность для значений табл. 6 составляет 1,38%, что свидетельствует об адекватности полученных уравнений и корректности рассчитанных значений удельной электропроводности расплавов смесей LiF+NaF.

Для сравнения в табл. 7 представлены числовые значения удельной электропроводности, полученные для эвтектической смеси различными методами для интервала температур 1020...1340 К. Относительные отклонения рассчитаны по отношению к значениям удельной электропроводности расплава эвтектической смеси (61% мол. LiF, 39% мол. NaF, 649° C), рассчитанных методом линейного интерполирования по справочным данным (см. табл. 3).

Сравнение значений удельной электропроводности расплавов смесей LiF+NaF от содер-

жания LiF в интервале температур 1020...1340 К, рассчитанных разными методами, показало, что средние значения относительного отклонения δ от значений, полученных по справочным данным линейной интерполяцией, составили для изоконцентрационного метода -0.18%, для изотермического метода 0.96%. Знак «-» означает превышение расчетных данных по отношению к экспериментальным. Анализ результатов, полученных изоконцентрационным и изотермическим методами, показал удовлетворительную согласованность рассчитанных числовых значений удельной электропроводности расплавов смесей LiF+NaF в интервале температур $(T_{\Pi\Pi} + n)$ $(n = 5, 10, 50, 75, 100^{\circ}$ выше $T_{\rm пл.}$, отвечающей ликвидусу), что позволяет судить о корректности предложенных методов аналитического описания и расчета удельной электропроводности составов расплавов смесей LiF+NaF.



Таблица 7 / Table 7

Значения удельной электропроводности (Om⁻¹cm⁻¹) эвтектической смеси LiF+NaF в интервале температур 1020...1340 K, рассчитанные разными методами Values of specific electrical conductivity (Ohm⁻¹cm⁻¹) of the LiF+NaF eutectic mixture in the temperature range 1020...1340 K, calculated by different methods

T	Линейное Изотермический интерполирование / метод / Linear interpolation Isothermal method		δ%	Изоконцентрационный метод / Isoconcentration method	δ%
1020	5.44	5.40	0.74	5.45	-0.18
1030	5.49	5.46	0.55	5.51	-0.36
1040	5.54	5.52	0.36	5.56	-0.36
1050	5.60	5.58	0.36	5.62	-0.36
1060	5.66	5.64	0.35	5.67	-0.18
1070	5.72	5.70	0.35	5.73	-0.17
1080	5.77	5.76	0.17	5.79	-0.35
1090	5.83	5.82	0.17	5.84	-0.17
1100	5.89	5.88	0.17	5.90	-0.17
1110	5.94	5.94	0.00	5.95	-0.17
1120	6.00	6.01	-0.17	6.01	-0.17
1130	6.05	6.07	-0.33	6.06	-0.17
1140	6.11	6.13	-0.33	6.12	-0.16
1150	6.16	6.19	-0.49	6.17	-0.16
1160	6.22	6.25	-0.48	6.23	-0.16
1170	6.28	6.31	-0.48	6.29	-0.16
1180	6.33	6.09	3.79	6.34	-0.16
1190	6.39	6.17	3.44	6.40	-0.16
1200	6.44	6.22	3.42	6.45	-0.16
1210	6.50	6.28	3.38	6.51	-0.15
1220	6.55	6.46	1.37	6.56	-0.15
1230	6.61	6.51	1.51	6.62	-0.15
1240	6.66	6.56	1.50	6.67	-0.15
1250	6.72	6.62	1.49	6.73	-0.15
1260	6.77	6.68	1.33	6.78	-0.15
1270	6.83	6.73	1.46	6.84	-0.15
1280	6.89	6.79	1.45	6.90	-0.15
1290	6.94	6.85	1.30	6.95	-0.14
1300	7.00	6.90	1.43	7.01	-0.14
1310	7.05	6.99	0.85	7.06	-0.14
1320	7.11	7.04	0.98	7.12	-0.14
1330	7.16	7.09	0.98	7.17	-0.14
1340	7.22	7.15	0.97	7.23	-0.14

Заключение

По данным литературы проведено аналитическое описание изоконцентрационным методом удельной электропроводности расплавов смесей LiF+NaF с содержанием LiF в смеси 0...100% мол. Полученные уравнения представлены прямолинейными зависимостями.

Изоконцентрационным методом рассчитана удельная электропроводность расплавов смесей LiF+NaF для интервала температур 1020...1340 К.

Интерполяционным, изоконцентрационным и изотермическим методами рассчитаны числовые значения удельной электропроводности расплава эвтектики (61% мол. LiF, 39% мол. NaF).



Изоконцентрационным и изотермическим методами рассчитана удельная электропроводность расплавов смесей LiF+NaF для температур ($T_{пл}$ + n) (n = 5°, 10°, 50°, 75°, 100° выше температур ликвидуса).

Проведен сравнительный анализ числовых значений удельной электропроводности составов расплавов смесей LiF+NaF, включая эвтектический состав, полученных предложенными методами.

Полученные зависимости позволяют рассчитать числовое значение удельной электропроводности для любых заданных концентраций LiF в расплавах смесей LiF+NaF в диапазоне от 0 до 100% мол. LiF, предварительно рассчитав коэффициенты a и b в зависимости от температуры.

Список литературы

- 1. *Коровин Н. В.* Химические источники тока: справочник / под ред. Н. В. Коровина и А. М. Скундина. М.: Изд-во МЭИ, 2003. 740 с.
- 2. *Делимарский Ю. К., Барчук Л. П.* Прикладная химия ионных расплавов. Киев: Наукова думка, 1988. 192 с.
- 3. Химическая энциклопедия : в 5 т. / под ред. И. Л. Кнунянца. М. : Сов. энцикл., 1990. Т. 2. 671 с.
- 4. Химическая энциклопедия : в 5 т. / под ред. И. Л. Кнунянца. М. : Большая Российская энцикл., 1992. Т. 3. 639 с.
- Присяжный В. Д., Кириллов С. А. Химические процессы в расплавленных солевых средах // Ионные расплавы. 1975. № 3. С. 82–90.
- 6. *Блинкин В. Л., Новиков В. Н.* Жидкосолевые ядерные реакторы. М.: Атомиздат, 1978. 111 с.
- 7. *Гаркушин И. К.* Применение солевых, оксидно-солевых и оксидных составов в технологии // Термический анализ и фазовые равновесия. Пермь: Перм. гос. ун-т, 1984. С. 101–111.
- 8. Гасаналиев А. М., Гаркушин И. К., Дебиров М. А., Трунин А. С. Применение расплавов в современной науке и технике. Махачкала: Деловой мир, 2011. 159 с.
- 9. *Chen B. X.*, *Peng J. P.*, *Wang Y. W.*, *Di Y. Z.* Study on Liquidus Temperature of NaF-KF-LiF-AlF₃ System with Low Cryolite Ratio // The Minerals, Metals & Materials Society and ASM International. 2020. Vol. 51, № 3. P. 1181–1189. https://doi.org/10.1007/s11663-020-01800-4
- 10. *Jiao H. D.*, *Wang J. X.*, *Tian D. H.*, *Jiao S*. Electrochemical Behaviour of $K_2\text{TiF}_6$ at Liquid Metal Cathodes in the LiF-NaF-KF Eutectic Melt // Electrochemistry. 2019. Vol. 87, $N_{\text{\tiny Ω}}$ 3. P. 142–147. https://doi.org/10.5796/electrochemistry.18-00019
- 11. Suzuki Y., Inoue Y., Yokota M., Goto T. Effects of Oxide Ions on the Electrodeposition Process of Silicon

- in Molten Fluorides // J. of the Electrochem. Soc. 2019. Vol. 166, N_{\odot} 13. P. D564–D568. https://doi.org/10.1149/2.0441913jes
- 12. *Magnusson J., Memmott M., Munro T.* Review of thermophysical property methods applied to fueled and unfueled molten salts // Annals of Nuclear Energy. 2020. Vol. 146. Paper № 107608. https://doi.org/10.1016/j. anucene.2020.107608
- 13. *Khokhlov V., Ignatiev V., Afonichkin V.* Evaluating physical properties of molten salt reactor fluoride mixtures // J. of Fluorine Chem. 2009. Vol. 130, № 1. P. 30–37. https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2008.07.018.
- 14. *Bulavin L., Plevachuk Yu., Sklyarchuk V., Shtablavyi I., Faidiuk N., Savchuk R.* Physical properties of liquid NaF-LiF-LaF₃ and NaF-LiF-NdF₃ eutectic alloys // J. of Nuclear Materials. 2013. Vol. 433, № 1–3. P. 329–333. https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2012.08.045.
- 15. *Минченко В. И., Степанов В. П.* Ионные расплавы: упругие и калорические свойства. Екатеринбург: УроРАН, 2008. 340 с.
- 16. Васина Н. А., Грызлова Е. С., Шапошникова С. Г. Теплофизические свойства многокомпонентных солевых систем. М.: Химия, 1984. 112 с.
- 17. *Janz G. J.*, *Garner G. L.*, *Krebs U.*, *Tomkins R. P. T.* Molten salts: Vol. 4. Part 1. Fluorides and mixtures. Electrical conductance, density, viscosity, and surface tension data // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1974. Vol. 3. P. 81. https://doi.org/10.1063/1.3253134
- 18. ACerS-NIST. Phase Equilibria Diagrams. CD-ROM Database. Version 3.1.0. American Ceramic Society. National Institute of Standards and Technology. URL: http://ceramics.org// (дата обращения: 21.02.2024).
- 19. Справочник по расплавленным солям / под ред. А. Г. Морачевского. Л.: Химия, 1971. Т. 1. 168 с.
- Справочник по плавкости систем из безводных неорганических солей: в 2 т. Т. 1: Двойные системы / сост. Н. К. Воскресенская, Н. Н. Евсеева, С. И. Беруль, И. П. Верещагина; под общ. ред. Н. К. Воскресенской. М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1961. 846 с.
- 21. Посыпайко В. И., Алексеева Е. А. Диаграммы плавкости солевых систем. Ч.1. Двойные системы с общим анионом. М.: Металлургия, 1977. 416 с.
- 22. Воздвиженский В. М. Прогноз двойных диаграмм состояния. М.: Металлургия, 1975. 224 с.
- RomatoskiL R. R., Hu W. Fluoride salt coolant properties for nuclear reactor applications: A review Author links open overlay panel // Annals of Nuclear Energy. 2017. Vol. 109. P. 635–647. https://doi.org/10.1016/J. ANUCENE.2017.05.036
- 24. Barborik P., Vaskova Z., Boca M., Priscak J. Physico-chemical properties of the system (LiF + NaF + KF(eut.) + Na₇Zr₆F₃₁): Phase equilibria, density and volume properties, viscosity and surface tension // J. of Chem. Thermodyn. 2014. Vol. 76. P. 145–151. https://doi.org/10.1016/J.JCT.2014.03.024
- 25. Гаркушин И. К., Лаврентьева О. В., Никитина А. С., Андреева Я. А. Расчет плотности расплавов смесей LiF + NaF // Известия Саратовского университета.

389



- Новая серия. Серия: Химия. Биология. Экология. 2020. Т. 20, вып. 3. С. 290–299. https://doi.org/10.18500/1816-9775-2020-20-3-290-299
- 26. Замалдинова Г. И., Парфенова С. Н., Гаркушин А. И., Гаркушин И. К., Слепушкин В. В. Свойства s¹-элементов, простых веществ, галогенидов и их смесей: аналитическое описание, расчет и взаимосвязь. Самара: Самар. гос. техн. ун-т, 2010. 202 с.
- 27. Карапетьянц М. Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств. М.: Ленанд, 2014. 408 с.
- 28. Викторов М. М. Методы вычисления физико-химических величин и прикладные расчеты. Л.: Химия, 1977. 360 с.
- 29. Гаркушин И. К., Лаврентьева О. В., Истомова М. А., Трунова А. Н., Парфенова С. Н., Гаркушин А. И., Колядо А. В. Методы расчета свойств элементов, простых веществ, соединений и смесей. Самара: Самар. гос. тех. ун-т, 2017. 467 с.
- 30. Гаркушин И. К., Кондратюк И. М., Дворянова Е. М., Данилушкина Е. Г. Анализ, прогнозирование и экспериментальное изучение рядов систем из галогенидов щелочных и щелочноземельных элементов. Екатеринбург: УрО РАН, 2006. 148 с.
- 31. *Кафаров В. В., Дорохов И. Н., Ветохин В. Н., Волков Л. П.* Формирование автоматизированной информационно-поисковой системы для идентификации сложных химических соединений // Докл. АН СССР. 1989. Т. 306, № 4. С. 911–915.
- 32. Волков Л. П. Закономерные и корреляционные взаимосвязи физико-химических свойств веществ. Теоретические и практические применения. Самара: Парус-Принт, 2002. 30 с.
- 33. Волков Л. П. Новые закономерные и корреляционные взаимосвязи физико-химических свойств веществ на множестве элементарных функциональных частиц. Теоретические и практические применения. Самара: Парус-Принт, 2003. 39 с.
- 34. Table Curve 2D. Automated Curve Fitting & Equation Discovery. Version 5.01. SYSTAT Software Inc, 2002.
- 35. *Вентцель Е. С.* Теория вероятностей. М.: Высш. шк., 2001. 575 с.
- 36. Чарыков А. К. Математическая обработка результатов химического анализа. Л.: Химия, 1984. 168 с.
- 37. Зайдель А. Н. Ошибки измерений физических величин. М.: Наука, 1974. 108 с.

References

- 1. Korovin N. V. *Khimicheskie istochniki toka: Spravochnik. Pod red. N. V. Korovina, A. M. Skundina* [Korovin N. V., Skundin A. M., eds. Chemical current sources: Handbook]. Moscow, Moscow Power Engineering Institute Publ., 2003. 740 p. (in Russian).
- 2. Delimarskij Yu. K., Barchuk L. P. *Prikladnaya khimiya ionnykh rasplavov* [Applied Chemistry of Ionic Melts]. Kiev, Naukova dumka, 1988. 192 p. (in Russian).

- 3. *Khimicheskaya entsiklopediya: v 5 t. Pod red. I. L. Knunyantsa* [Knunyants I. L., ed. The Chemical Encyclopedia: in 5 vols.]. Moscow, Sovetskaya entsiklopediya Publ., 1990, vol. 2. 671 p. (in Russian).
- 4. *Khimicheskaya entsiklopediya: v 5 t. Pod red. I. L. Knunyantsa* [Knunyants I. L., ed. The Chemical Encyclopedia: in 5 vols.]. Moscow, Bol'shaya Rossiyskaya entsiklopediya Publ., 1992, vol. 3. 639 p. (in Russian).
- 5. Prisyazhnyj V. D., Kirillov S. A. Chemical processes in molten salt environments. *Ionic Melts*, 1975, vol. 3, pp. 82–90 (in Russian).
- 6. Blinkin B. L., Novikov V. N. *Zhidkosolevye yadernye reaktory* [Molten salt nuclear reactors]. Moscow, Atomizdat, 1978. 111 p. (in Russian).
- 7. Garkushin I. K. The use of salt, oxide-salt and oxide compositions in technology. In: *Termicheskiy analiz i fazovyye ravnovesiya* [Thermal analysis and phase equilibria]. Perm', Perm State University Publ., 1984, pp. 101–111 (in Russian).
- 8. Gasannaliev A. M., Garkushin I. K., Debirov M. A., Trunin A. S. *Primenenie rasplavov v sovremennoj nauke i tekhnike* [The use of melts in modern science and technology]. Mahachkala, Delovoy mir, 2011. 159 p. (in Russian).
- Chen B. X., Peng J. P., Wang Y. W., Di Y. Z. Study on Liquidus Temperature of NaF-KF-LiF-AlF₃ System with Low Cryolite Ratio. *The Minerals, Metals & Materials* Society and ASM International, 2020, vol. 51, no. 3, pp. 1181–1189. https://doi.org/10.1007/s11663-020-01800-4
- Jiao H. D., Wang J. X., Tian D. H., Jiao S. Electrochemical Behaviour of K₂TiF₆ at Liquid Metal Cathodes in the LiF-NaF-KF Eutectic Melt. *Electrochemistry*, 2019, vol. 87, no. 3, pp. 142–147. https://doi.org/10.5796/electrochemistry.18-00019
- 11. Suzuki Y., Inoue Y., Yokota M., Goto T. Effects of Oxide Ions on the Electrodeposition Process of Silicon in Molten Fluorides. *J. of the Electrochem. Soc.*, 2019, vol. 166, no. 13, pp. D564–D568. https://doi.org/10.1149/2.0441913jes
- Magnusson J., Memmott M., Munro T. Review of thermophysical property methods applied to fueled and un-fueled molten salts. *Annals of Nuclear Energy*, 2020, vol. 146, pp. 107608. https://doi.org/10.1016/j. anucene.2020.107608
- 13. Khokhlov V., Ignatiev V., Afonichkin V. Evaluating physical properties of molten salt reactor fluoride mixtures. *J. of Fluorine Chemistry*, 2009, vol. 130, no. 1, pp. 30–37. https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2008.07.018
- 14. Bulavin L., Plevachuk Yu., Sklyarchuk V., Shtablavyi I., Faidiuk N., Savchuk R. Physical properties of liquid NaF-LiF-LaF₃ and NaF-LiF-NdF₃ eutectic alloys. *J. of Nuclear Materials*, 2013, vol. 433, no. 1–3, pp. 329–333. https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2012.08.045
- 15. Minchenko V. I., Stepanov V. P. *Ionnyye rasplavy: uprugiye i kaloricheskiye svoystva* [Ionic melts: Elastic and caloric properties]. Ekaterinburg, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences Publ., 2008. 340 p. (in Russian).
- 16. Vasina N. A., Gryzlova E. S., Shaposhnikova S. G. Teplofizicheskie svoystva mnogokomponentnykh



- *solevykh sistem* [Thermophysical properties of multicomponent salt systems]. Moscow, Khimiya, 1984. 112 p. (in Russian).
- 17. Janz G. J., Garner G. L., Krebs U., Tomkins R. P. T. Molten salts: 4. Part 1. Fluorides and mixtures. Electrical conductance, density, viscosity, and surface tension data. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1974, vol. 3, pp. 81. https://doi.org/10.1063/1.3253134
- 18. ACerS-NIST. Phase Equilibria Diagrams. CD-ROM Database. Version 3.1.0. American Ceramic Society. National Institute of Standards and Technology. Available at: http://ceramics.org// (accessed April 29, 2021).
- 19. *Spravochnik po rasplavlennym solyam. Pod red. A. G. Morachevskogo.* Vol. 1 [Morachevskij A. G., ed. Handbook of molten salts. Vol. 1]. Leningrad, Khimiya, 1971. 168 p. (in Russian).
- 20. Spravochnik po plavkosti sistem iz bezvodnykh neorganicheskikh soley: v 2 t. T. 1: Dvoynyye sistemy. Sost. Voskresenskaya N. K., Evseeva N. N., Berul' S. I., Vereshchagina I. P. Pod red. N. K. Voskresenskoj [Voskresenskaya N. K., ed. A handbook to the fusibility of systems of anhydrous inorganic salt: in 2 vols. Vol. 1: Binary systems]. Moscow, Leningrad, Izd-vo AN SSSR, 1961. 846 p. (in Russian).
- 21. Posypajko V. I., Alekseeva E. A. *Diagrammy plavkosti* solevykh sistem. *Ch.1. Dvojnye sistemy s obshchim anionom* [Fusibility diagrams of salt systems. Part 1. Binary systems with a common anion]. Moscow, Metallurgiya, 1977. 416 p. (in Russian).
- 22. Vozdvizhenskij V. M. *Prognoz dvojnykh diagramm sostoyaniya* [Forecast of binary state diagrams]. Moscow, Metallurgiya, 1975. 224 p. (in Russian).
- 23. Romatoski R. R., Hu W. Fluoride salt coolant properties for nuclear reactor applications: A review Author links open overlay panel. *Annals of Nuclear Energy*, 2017, vol. 109, pp. 635–647. https://doi.org/10.1016/J. ANUCENE.2017.05.036
- 24. Barborik P., Vaskova Z., Boca M., Priscak J. Physicochemical properties of the system (LiF + NaF + KF(eut.) + Na₇Zr₆F₃₁): Phase equilibria, density and volume properties, viscosity and surface tension. *J. of Chem. Thermodyn.*, 2014, vol. 76, pp. 145–151. https://doi.org/10.1016/J.JCT.2014.03.024
- Garkushin I. K., Lavrenteva O. V., Nikitina A. S., Andreeva Ya. A. Density calculation for melts of mixture LiF+NaF. *Izvestiya of Saratov University*. *Chemistry*. *Biology*. *Ecology*, 2020, vol. 20, iss. 3, pp. 290–299 (in Russian). https://doi.org/10.18500/1816-9775-2020-20-3-290-299
- 26. Zamaldinova G. I., Parfenova S. N., Garkushin A. I., Garkushin I. K., Slepushkin V. V. Svojstva s¹-elementov, prostykh veshchestv, galogenidov i ikh smesey: analiticheskoe opisanie, raschet i vzaimosvyaz' [Properties of s¹-elements, simple substances, halogenides and their mixes: Analytical description,

- calculation and interrelation]. Samara, Samara State Technical University Publ., 2010. 202 p. (in Russian).
- 27. Karapetyants M. Kh. *Metody sravnitel'nogo rascheta fiziko-khimicheskikh svoystv* [Methods for comparative calculation of physical and chemical properties]. Moscow, Lenand, 2014. 408 p. (in Russian).
- 28. Viktorov M. M. *Metody vychisleniya fiziko-khimicheskikh velichin i prikladnye raschety* [Methods for calculating physico-chemical quantities and applied calculations]. Leningrad, Khimiya, 1977. 360 p. (in Russian).
- 29. Garkushin I. K., Lavrent'eva O. V., Istomova M. A., Trunova A. N., Parfenova S. N., Garkushin I. K., Kolyado A. V. *Metody rascheta svojstv elementov, prostykh veshchestv, soedineniy i smesey: uchebnoe posobie* [Methods for calculating the properties of elements, simple substances, compounds and mixes]. Samara, Samara State Technical University Publ., 2017. 467 p. (in Russian).
- 30. Garkushin I. K., Kondratyuk I. M., Dvoryanova E. M., Danilushkina E. G. *Analiz*, *prognozirovanie i eksperimental'noe issledovanie ryadov sistem iz galogenidov shchelochnykh i shchelochnozemel'nykh elementov* [Analysis, forecasting and experimental study of series of halogenides systems of alkaline and alkaline-earth elements]. Ekaterinburg, UrO RAN Publ., 2006. 148 p. (in Russian).
- 31. Kafarov V. V., Dorokhov I. N., Vetokhin V. N., Volkov L. P. Automated computer structure identification of chemical compounds. *USSR Academy of Sciences*, 1989, vol. 306, no. 4, pp. 911–915 (in Russian).
- 32. Volkov L. P. *Zakonomernye i korrelyatsionnye vzai-mosvyazi fiziko-khimicheskikh svoystv veshchestv. Teoreticheskie i prakticheskie primeneniya* [Regular and correlation relationships of physicochemical properties of substances. Theoretical and practical applications]. Samara, Parus-Print, 2002. 30 p. (in Russian).
- 33. Volkov L. P. Novye zakonomernye i korrelyatsionnye vzaimosvyazi fiziko-khimicheskikh svoystv veshchestv na mnozhestve elementarnykh funktsional'nykh chastits. Teoreticheskie i prakticheskie primeneniya [New regular and correlation relationships of physicochemical properties of substances on a multitude of elementary functional particles. Theoretical and practical applications]. Samara, Parus-Print, 2003. 39 p. (in Russian).
- 34. Table Curve 2D. Automated Curve Fitting & Equation Discovery. Version 5.01. SYSTAT Software Inc, 2002.
- 35. Venttsel' E. S. *Teoriya veroyatnostey* [Probability theory]. Moscow, Vysshaya shkola, 2001. 575 p. (in Russian).
- 36. Charykov A. K. *Matematicheskaya obrabotka rezul'tatov khimicheskogo analiza* [Mathematical processing of the chemical analysis results]. Leningrad, Khimiya, 1984. 168 p. (in Russian).
- 37. Zajdel' A. N. *Oshibki izmereniy fizicheskikh velichin* [Errors of physical quantitiesmeasurements]. Moscow, Nauka, 1974. 108 p. (in Russian).

Поступила в редакцию: 08.05.2024; одобрена после рецензирования 20.09.24; принята к публикации 25.09.2024; опубликована 25.12.2024 The article was submitted 08.05.2024; approved after reviewing 20.09.24; accepted for publication 25.09.2024; published 25.12.2024