

УДК 536+669.017.53+621.039

DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2025.1.03>*Оригинальная статья / Original paper*

Полуэмпирический прогностический расчет теплофизических свойств расплавов калия с натрием по данным их компонентов

С.В. Терехов

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, 283048, ДНР, г. Донецк, ул. Розы Люксембург, 72

Реферат. Применение жидкометаллических теплоносителей в ядерных энергетических установках вызывает постоянный интерес к теплофизическим свойствам металлов и их сплавов как у экспериментаторов, так и у теоретиков. Для аппроксимации температурных изменений теплоемкости, коэффициента теплового линейного (объемного) расширения и других величин экспериментаторы используют степенные полиномы. На разных температурных интервалах эти многочлены имеют разный вид и для получения целостной картины должны сшиваться на концах диапазонов. Такой подход создает ряд сложностей не только при разработке единой методики расчета тепловых функций металлов, но и для прогнозирования поведения их расплавов и сплавов. Для решения поставленной проблемы использованы авторская модель двухфазной (с разными параметрами порядка) локально-равновесной области и модифицированное правило смешения компонентов с учетом согласованных между собой массивов экспериментальных данных по исходным металлам для прогностического расчета теплофизических характеристик расплавов калия с натрием. Показано, что применение модели двухфазной локально-равновесной области, новых аппроксимирующих функций и эмпирических формул приводит к достаточно адекватной оценке теплоемкостей, коэффициентов теплового линейного расширения, плотностей, теплопроводностей и температуропроводностей расплавов. Установлено несоответствие между математическим описанием теплопроводности расплава $K_{56}Na_{44}$ и ее экспериментальными значениями.

Ключевые слова: жидкометаллический теплоноситель, правило смешения, теплоемкость, коэффициент теплового линейного расширения, плотность, теплопроводность, температуропроводность.

Для цитирования: Терехов С.В. Полуэмпирический прогностический расчет теплофизических свойств расплавов калия с натрием по данным их компонентов. *Известия вузов. Ядерная энергетика*. 2025;1:37–50. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2025.1.03>

Введение

На протяжении 70-ти лет жидкометаллические системы калия, натрия и их расплавы вызывают постоянный интерес у исследователей, так как они применяются в качестве теплоотводящей жидкости в ядерных энергетических установках [1 – 11]. В качестве теплоносителей используют эвтектический сплав $K_{78}Na_{22}$ (с температурой плавления $T_m = 260.5$ К и массовыми долями компонентов $n_1 = 0.78$, $n_2 = 0.22$) и соединение KNa_2 (сплав $K_{56}Na_{44}$ с температурой плавления $T_m = 280$ К и массовыми долями компонентов $n_1 = 0.56$, $n_2 = 0.44$; см. диаграмму состояния калий-натрий в работе [12]). Поэтому тепловые свойства указанных систем очень важны при исследовании термо- и гидродинамических процессов в трубах энергетических установок. Тепловыми характеристиками расплавов являются теплоемкость C [Дж/(моль·К)] (или удельная теплоемкость c [Дж/(кг·К)]), коэффициент теплового линейного (объемного) расширения α_L (α_V) [1/К], плотность ρ [кг/м³], тепло- и температуропроводность λ [Вт/(м·К)] и a [м²/с] соответственно.

Известно, что классическая теория металлов [13, 14] базируется на их представлении в виде совокупности свободных электронов и колебаний кристаллической решетки – фононов. Такой подход позволяет получить только качественные результаты [14, 15], но не количественное описание массивов экспериментальных данных. Например, модели теплоемкости Эйнштейна, Дебая и их различные модификации не описывают возрастание теплоемкостей большинства веществ с ростом температуры. Они не могут объяснить наличие скачков (структурные фазовые превращения), округлых (фазовые переходы I рода, например, кристалл-жидкость) или острых (фазовые переходы II рода, например, ферромагнетик-парамагнетик) пиков и ям на температурной зависимости теплоемкости. Модели теплопроводности лишь фиксируют наличие пика в окрестности абсолютного нуля на температурной кривой и указывают причиной его возникновения наличие примесей в металле [13]. По-видимому, это связано с тем, что существующие теоретические построения не учитывают наличия в металлах подсистем других квазичастиц [16, 17]. В частности, процессы упорядочения в них с наличием тепловых эффектов оказывают влияние на вид температурной зависимости тепловой характеристики.

С другой стороны, несоответствия между экспериментальными данными по теплофизическим свойствам расплавов и их компонентов [1 – 3, 6, 7, 9, 18, 23], входящие в различные базы данных [24, 25], обусловлены целым рядом факторов. К ним относятся предварительная подготовка образца (обработка поверхности, термический отжиг, вакуумирование и другие), используемый тип измерительного прибора и его точность, атмосфера во внутренней камере прибора, методика исследования, учет кинетических процессов в веществе и так далее. В этой связи для описания экспериментальных массивов данных необходимо выбирать согласующиеся между собой результаты измерений. Следует также признать неудовлетворительной математическую аппроксимацию экспериментальных температурных зависимостей теплофизических характеристик с помощью степенных функций. Они не пригодны для описания кривых и особенностей на них на всем интервале существования конденсированного состояния вещества. Поэтому требуется разработка новых физических моделей и использование новых приближающих математических функций для описания тепловых свойств жидкометаллических расплавов, используемых в ядерных и термоядерных энергетических установках.

Одной из нерешенных проблем современного металловедения является прогнозирование свойств расплавов по данным об аналогичных характеристиках их компонентов. Вследствие этого целью работы является применение модели двухфазной локально-равновесной области [26 – 31], модифицирование правила смешения компонентов [32] (в химии – правила получения соединения заданного состава), учет баз экспериментальных данных вида [33] и введение новых аппроксимирующих функций для расчета теплофизических свойств расплавов калия с натрием и их компонентов.

Модифицированное правило смешения. Согласованный расчет теплофизических свойств калия, натрия и их расплавов

Модификация правила смешения компонентов. Для получения системы заданного состава из компонентов с характеристиками A_i и мольными долями n_i ($i = 1, 2$) применяют правило [32]:

$$A_s(T) = n_1 A_1(T) + n_2 A_2(T), \quad (1)$$

где $A_s(T)$ – свойство системы в целом. Формула (1) дает весьма приближенные значения величин системы, поэтому предлагается ее изменение в виде

$$A(T) = g(T_0) [A_s(T) + f(T)], \quad (2)$$

здесь $g(T_0) = A_e(T_0) / A_s(T_0)$ – поправочный коэффициент, равный отношению характеристики расплава, измеренной при температуре T_0 , к характеристике системы в целом, рассчитанной при той же температуре по правилу смешения (1); $f(T)$ – аппроксимирующая функция. В дальнейшем расчеты теплоемкости C (или удельной теплоемкости c) и коэффициента теплового линейного расширения α_L (КТЛР) будем проводить по формулам модели двухфазной области [27 – 31], а других характеристик – с использованием известных соотношений, аппроксимирующих функций и формулы (2).

Для проведения оценочных расчетов теплофизических свойств калия, натрия и их сплавов $K_{78}Na_{22}$ и $K_{56}Na_{44}$ был проведен отбор согласующихся между собой массивов экспериментальных данных. Зачастую разброс экспериментальных величин, полученных разными авторами, значителен, что связано с целым рядом причин. К ним относятся предварительная подготовка образца, наличие в нем летучих примесей, выбор материала тигля и атмосферы в измерительной камере, тип и класс точности используемой аппаратуры и т. д. Использование самосогласованных данных позволило снизить погрешности расчета до уровня менее 5 % (за исключением температуропроводности сплава $K_{56}Na_{44}$ при температурах свыше 1000 К (рис. 5)).

Теплоемкость. Для вычисления теплоемкостей калия и натрия воспользуемся соотношениями, приведенными в работах [27–31]. Расчетная формула имеет вид

$$C = C_b + C_k \quad (3)$$

где первое слагаемое описывает базисную линию теплоемкости, а также возможные скачки на ней (структурные превращения) и задается выражением

$$C_b = k_1 T + \sum_j k_{2j} x_{1j}, \quad (4)$$

k_1 и k_{2j} – постоянные коэффициенты; T [K] – температура; x_{1j} – объемная доля упорядочиваемой фазы в подсистеме j , равная

$$x_{1j} = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{th} \left(a_j \frac{T_{xj} - T}{T} \right) \right]; \quad (5)$$

a_j – параметр, связанный с изменением химического потенциала фазы 1 в подсистеме j ; T_{xj} – температура сосуществования двух фаз с равными объемными долями. Второе слагаемое в (3) связано с реализацией фазовых переходов и определяется равенством

$$C_k = T \sum_j k_{3j} u_j, \quad (6)$$

где k_{3j} – константы, $u_j = \partial x_{1j} / \partial T$.

В таблице 1 приведены параметры модели для калия и натрия, а на рис. 1 представлены температурные зависимости их удельных теплоемкостей, там же показаны результаты прогностической оценки по формуле (2) изменений от температуры удельных теплоемкостей сплавов $K_{78}Na_{22}$ и $K_{56}Na_{44}$. Для расплава $K_{78}Na_{22}$ подгоночный коэффициент равен $g(T_0) = 1$, при этом функция $f(T) = 0$. Для расплава $K_{56}Na_{44}$ параметр $g(T_0) = 1$; функция $f(T) = T[k_{31}u_1 + k_{32}u_2] - 7.6$, $k_{31} = 200$, $u_1 = dx_{11}/dT$, x_{11} : $T_{x1} = 418$, $a_1 = 0.3$, $k_{32} = 5.8$, $u_2 = dx_{12}/dT$, x_{12} : $T_{x1} = 1170$, $a_2 = 6$. Из рисунка 1 видно, что формула (2) дает неплохое согласие с экспериментальными данными.

Таблица 1

Параметры теоретического построения для расчета теплоемкостей калия и натрия

Металл	Параметры									
	T_{x1}	a_1	$k_1 \cdot 10^3$	k_2	T_{x2}	a_2	k_{32}	T_{x3}	a_3	k_{33}
K	35	0.82	2.5	32.3	336.53	7.8	0.43	435	2.0	3.6
	T_{x4}	a_4	k_{34}	T_{x5}	a_5	k_{35}	T_{x6}	a_6	k_{36}	T_{x7}
	1570	1.9	1.3	2180	2.8	7.6	2540	5.1	6.5	2800
	a_7	k_{37}								
	5.1	3.8								
Na	T_{x1}	a_1	$k_1 \cdot 10^3$	k_2	T_{x2}	a_2	k_{32}	T_{x3}	a_3	k_{33}
	53	0.78	0.7	33.6	370.94	5.8	0.8	510	1.8	3.1
	T_{x4}	a_4	k_{34}	T_{x5}	a_5	k_{35}				
	1618	4.1	1.0	2320	4.1	6.3				

Коэффициент теплового линейного расширения (КТЛР). Второе правило Грюнайзена [34, с. 14] устанавливает связь между теплоемкостью (3) и коэффициентом теплового линейного расширения (КТЛР) α_L , что позволяет рассчитать его по формуле

$$\alpha_L \cdot 10^6 = q_1 T + q_2 x + q_3 Tu, \quad (7)$$

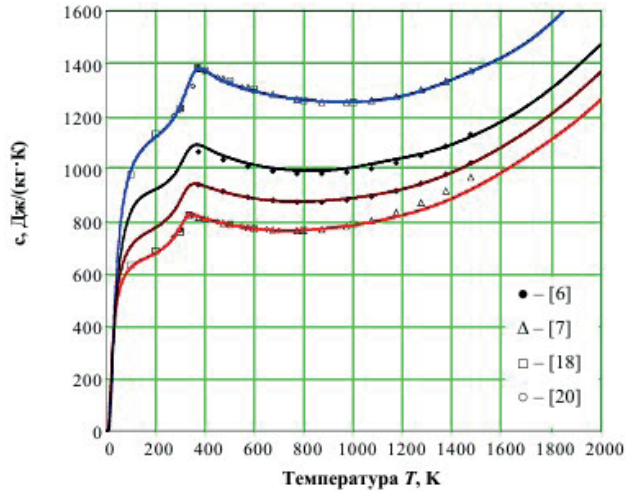


Рис. 1. Температурные зависимости удельных теплоемкостей калия К (красная линия), натрия Na (синяя линия) и оценка изменений удельных теплоемкостей расплавов $K_{78}Na_{22}$ (коричневая линия) и $K_{56}Na_{44}$ (черная линия) с температурой по модифицированному правилу смешения (2)

где q_1, q_2, q_3 – постоянные коэффициенты. В таблице 2 приведены параметры теоретического построения для калия и натрия, а на рис. 2 представлены зависимости их КТЛР от температуры. При расчете КТЛР натрия проводилось согласование с данными по плотности натрия. На рисунке 2 также показаны результаты расчета по формуле (7) изменений от температуры КТЛР сплавов $K_{78}Na_{22}$ и $K_{56}Na_{44}$. Для расчета подгоночного коэффициента $g(T_0)$ ($f(t)=0$) при вычислении КТЛР расплавов использована формула из [23], связывающая КТЛР с температурой плавления T_m . Следовательно, прогностический расчет КТЛР расплавов проведен по формуле (2) при $f(T)=0$: $g(260.5)=1.78$ для $K_{78}Na_{22}$ и $g(280)=1.6$ для $K_{56}Na_{44}$. Подтверждение полученных результатов возможно при проведении измерений на неисследованных температурных интервалах.

Таблица 2

Параметры модели для расчета КТЛР калия и натрия

Металл	Параметры						
	T_{x1}	a_1	$q_1 \cdot 10^3$	q_2	T_{x2}	a_2	q_3
К	49	0.48	3	99	336.53	5.6	6
Na	98	0.81	28	84	1156.1	1.2	24.0

Плотность. Температурная зависимость плотности вещества определяется формулой

$$\rho(T) = \rho_0(T_0)[1 + \alpha_T(T)(T_0 - T)], \quad (8)$$

где объемные коэффициенты КТОР калия и натрия вычислены из равенств ($T_0=293$ К)

$$K: \alpha_{T1}(T) = 3.9 \cdot \alpha_{L1}(T), \rho_{01}(T_0) = 845; Na: \alpha_{V2}(T) = 2.07 \cdot \alpha_{L2}(T), \rho_{02}(T_0) = 931. \quad (9)$$

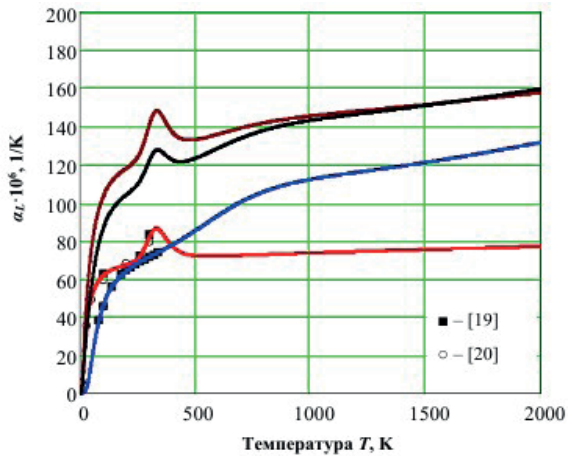


Рис. 2. Зависимости от температуры КТЛР калия К (красная линия), натрия Na (синяя линия) и оценки изменений КТЛР с температурой расплавов $K_{78}Na_{22}$ (коричневая линия) и $K_{56}Na_{44}$ (черная линия) по модифицированному правилу смешения

На рисунке 3 показаны температурные кривые плотности калия и натрия, рассчитанные по формуле (8), там же приведены температурные изменения плотностей расплавов $K_{78}Na_{22}$ и $K_{56}Na_{44}$. По формуле (2) для расплава $K_{78}Na_{22}$ величины $g(T_0)=1$, $f(T)=0$, а для расплава $K_{56}Na_{44}$ линия плотности построена при подгоночных величинах $g(T_0)=1$, $f(T)=14$.

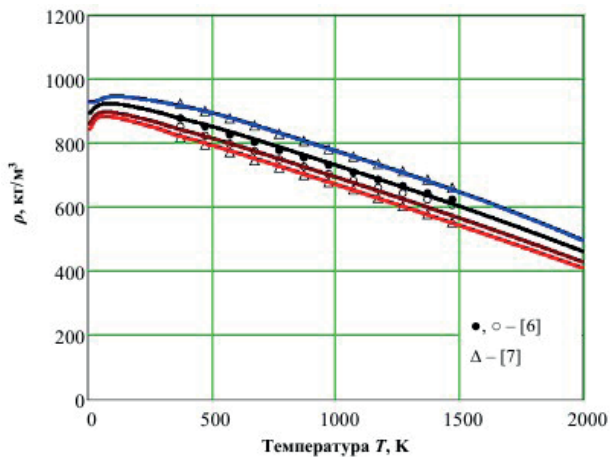


Рис. 3. Изменения с температурой плотностей калия К (красная линия), натрия Na (синяя линия) и оценки зависимостей плотностей от температуры для расплавов $K_{78}Na_{22}$ (коричневая линия) и $K_{56}Na_{44}$ (черная линия) по модифицированному правилу смешения

Теплопроводность. Распространение тепла в локально-равновесной двухфазной области сопровождается ее тепловым расширением. Температурные изменения теплопроводностей калия и натрия описываются соотношениями вида:

$$\lambda(T) = \lambda_L(T) + k_2 x_1(T) + [k_{31} u_1(T) + k_{32} u_2(T)] T, \quad (10)$$

где аппроксимационная функция $\lambda_L(T)$ имеет вид

$$\lambda_L(T) = pT + s. \quad (11)$$

Параметры модели из формулы (10) приведены в табл. 3. На рисунке 4 продемонстрировано температурное поведение теплопроводностей калия и натрия, рассчитанных по формулам (10) и (11), там же приведены температурные изменения теплопроводностей расплавов $K_{78}Na_{22}$ и $K_{56}Na_{44}$, проведено сравнение с экспериментальными данными [18, 21, 22, 33, 35].

Таблица 3

Параметры модели для расчета теплопроводностей калия и натрия

Металл	Параметры аппроксимирующих функций							
	p	s	T_x	a_1	k_2	$\frac{T_{x1}}{T_{x2}}$	$\frac{a_{21}}{a_{22}}$	$\frac{k_{31}}{k_{32}}$
K	-0.026	105.2	336.0	2000	-45.3	4.0 -	1.9 -	1889.4 -
Na	-0.047	152.0	371.01	2000	-50.0	5.9 64.0	2.0 1.2	5444.9 -124.0

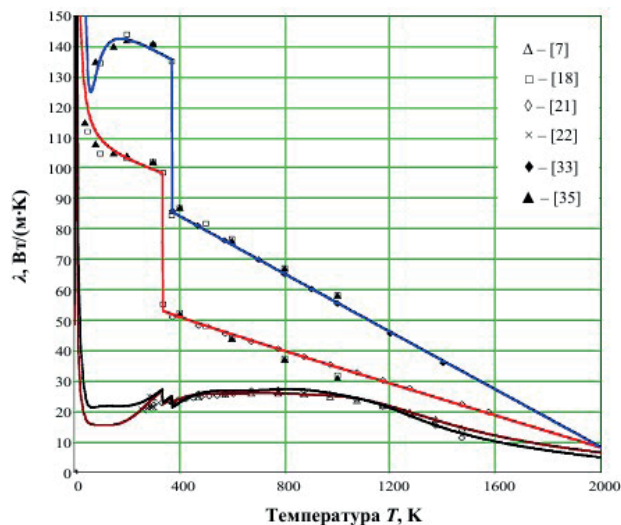


Рис. 4. Температурное поведение теплопроводностей калия K (красная линия), натрия Na (синяя линия) и оценка изменений теплопроводностей расплавов $K_{78}Na_{22}$ (коричневая линия) и $K_{56}Na_{44}$ (черная линия) от температуры по модифицированному правилу смешения

По формуле (2) для расплава $K_{78}Na_{22}$ подгоночный коэффициент $g(293) = 0.133$, а функция $f(T)$ рассчитана по формуле вида (6) при значениях параметров из табл. 4. Расчет теплопроводности жидкого расплава $K_{56}Na_{44}$ проводился с использованием

Параметры модели для расчета аппроксимирующей функции

Расплав	Параметры											
	T_{x1}	a_1	k_{31}	T_{x2}	a_2	k_{32}	T_{x3}	a_3	k_{33}	T_{x4}	a_4	k_{34}
$K_{78}Na_{22}$	620	0.9	50	690	1.0	175	810	3.1	22	1200	2.8	48
$K_{56}Na_{44}$	640	1.4	100	980	2.9	30	1000	1.2	20	1200	5.0	8

данных из [33]: подгоночный коэффициент $g(293)=0.135$ а функция $f(T)$ рассчитана по формуле вида (6) при значениях параметров из табл. 4.

Температуропроводность. Эта теплофизическая характеристика определяет перенос внутренней энергии и вычисляется по формуле [36, с. 8]

$$a = \lambda / (c \cdot \rho), \quad (12)$$

где λ – теплопроводность; $c = C/M_a$ – удельная теплоемкость; M_a , 10^{-3} [кг/моль] – атомная (молекулярная) масса металла (расплава), – плотность.

На рисунке 5 продемонстрированы температурные кривые температуропроводностей калия ($M_{a1} = 39.098 \cdot 10^{-3}$), натрия ($M_{a2} = 22.989 \cdot 10^{-3}$) и их расплавов, вычисленные по формуле (12). В таблице 5 приведены значения теплофизических характеристик расплавов в окрестности фазового перехода твердое тело – жидкость.

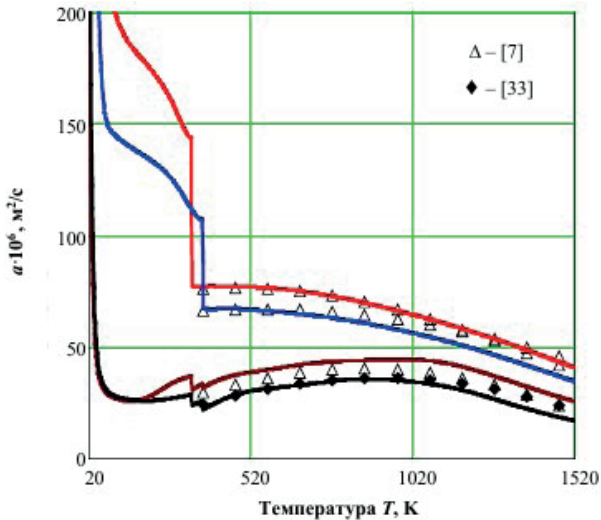


Рис. 5. Температурные зависимости температуропроводностей калия К (красная линия), натрия Na (синяя линия) и оценка изменений температуропроводностей расплавов $K_{78}Na_{22}$ (коричневая линия) и $K_{56}Na_{44}$ (черная линия)

Таблица 5

Изменения тепловых свойств расплавов $K_{78}Na_{22}$ (верхняя строка) и $K_{56}Na_{44}$ (нижняя строка) в окрестности точки фазового перехода твердое тело – жидкость

Свойство	Температура, К					
	340	350	360	370	380	390
c [Дж/(кг·К)]	936.1 1078	940.8 1086	942.1 1090	941.1 1090.7	938.8 1088.9	935.9 1085.5
$\alpha_L \cdot 10^6$ [1/К]	148.2 127.9	147 127.4	145.1 126.5	143 125.4	140.9 124.3	138.9 123.4
ρ [кг/м ³]	852 886.4	849.6 884.3	847.4 882.2	845.2 880.2	843.1 878.3	841.1 876.4
λ [Вт/(м·К)]	22.5 23.1	23.2 23.7	23.8 24.4	24.3 25	23.3 21.7	23.8 22.3
$a \cdot 10^6$ [м ² /с]	31.1 24.1	31.9 24.7	32.8 25.4	33.6 26.1	32.4 22.7	33.2 23.5

Заключение

Использование модели двухфазной области, модифицированного правила смешения и новых аппроксимирующих функций позволяет при знании единственного экспериментального значения теплофизической характеристики провести практически согласованный расчет теплоемкостей, коэффициентов теплового линейного расширения, плотностей, тепло- и температуропроводностей расплавов калия с натрием и их компонентов, причем от температуры абсолютного нуля до температуры испарения. Коррекция теоретических результатов с помощью модифицированного правила получения системы с заданным составом приводит к созданию последовательной программы расчета теплофизических свойств расплава и его компонентов. На этот факт указывает достаточно адекватное описание температуропроводностей калия, натрия и их расплавов, полученное с использованием скорректированных величин теплофизических величин компонентов. Различия между теоретическими и экспериментальными данными для температуропроводности расплава $K_{56}Na_{44}$ при температурах свыше 1000 К возможно связаны с протеканием кинетических процессов, формирующих фазовый переход жидкость – газ. Поэтому необходимы прецизионные исследования температуропроводности расплава $K_{56}Na_{44}$ для температур свыше 1000 К.

Литература

- Новиков И.И., Соловьев А.Н., Хабахпашева Е.М., Груздев В.А., Приданцев А.И., Васенина М.Я. Теплоотдача и теплофизические свойства расплавленных щелочных металлов. *Атомная энергия*. 1956;1(4):92–106.
- Кириллов П.Л., Троянов М.Ф. Об одной ошибке в значениях теплоемкости сплавов натрия с калием. *Атомная энергия*. 1958;5(4):491.
- Руднев И.И., Ляшенко В.С., Абрамович М.Д. Температуропроводность натрия и лития. *Атомная энергия*. 1961;11(3):230–232.
- Субботин В.И., Ивановский М.Н., Арнольдов М.Н. Физикохимические основы применения жидкометаллических теплоносителей. М.: Атомиздат, 1970, 296 с.

5. Алексеев В.А., Андреев А.А., Прохоренко В.Я. Электрические свойства жидких металлов и полупроводников. *Успехи физических наук*. 1972;106(3):393–429. DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.0106.197203a.0393>
6. Кириллов П.Л., Юрьев Ю.С., Бобков В.П. Справочник по теплогидравлическим расчетам (ядерные реакторы, теплообменники, парогенераторы). М.: Энергоатомиздат, 1990, 360 с.
7. Кириллов П.Л., Богословская Г.П. Теплообмен в ядерных энергетических установках. М.: Энергоатомиздат, 2000, 456 с.
8. Рачков В.И., Арнольдov М.Н., Ефанов А.Д., Калякин С.Г., Козлов Ф.А., Логинов Н.И., Орлов Ю.И., Сорокин А.П. Использование жидких металлов в ядерной, термоядерной энергетике и других инновационных технологиях. *Теплоэнергетика*. 2014;5:20–30. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0040363614050087>
9. Фокин Л.Р., Кулямина Е.Ю. Плотность жидкого калия на линии насыщения: краткая история длиной в 50 лет. *Теплофизика высоких температур*. 2021;59(5):679–685. DOI: <https://doi.org/10.31857/S0040364421050057>
10. Кузина Ю.А., Сорокин А.П., Дельнов В.Н., Денисова Н.А., Сорокин Г.А. Теплогидравлические исследования щелочных жидкометаллических теплоносителей в обоснование ядерных энергетических установок. *Известия вузов. Ядерная энергетика*. 2022;2:49–61. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2022.2.05>
11. Сорокин А.П., Кузина Ю.А., Асхадуллин Р.Ш., Алексеев В.В. Исследования физхимии и технологии щелочных жидкометаллических теплоносителей для ядерных и термоядерных энергетических установок. *Известия вузов. Ядерная энергетика*. 2022;3:5–17. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2022.3.01>
12. Лякишев Н.П., Банных О.А., Рохлин Л.Л. и др. Диаграммы состояния двойных металлических систем. Справочник: В 3 т.: Т. 3. Кн. I. Под общ. ред. Н.П. Лякишева. М.: Машиностроение, 2001, 872 с. ISBN 5-217-02843-2 (Т. 3).
13. Лившиц Б.Г., Крапошин В.С., Липецкий Я.Л. Физические свойства металлов и сплавов. М.: Металлургия, 1980, 320 с.
14. Grimvall G. The Electron-phonon Interaction in Metals. Amsterdam; New York; Oxford: North-Holland, 1981, 304 p.
15. Кошман В.С. Об одном подходе к обобщению опытных данных по теплофизическим свойствам элементов Периодической системы Д.И. Менделеева. *Пермский аграрный вестник*. 2014;2(6):35–42.
16. Каганов М.И., Лифшиц И.М. Квазичастицы (идеи и принципы квантовой физики твердого тела). М.: Наука, 1976, 80 с.
17. Брандт Н.Б., Кульбачинский В.А. Квазичастицы в физике конденсированного состояния. М.: Физматлит, 2005, 632 с. ISBN 5-9221-0564-7.
18. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989, 384 с.
19. Лариков Л.Н., Юрченко Ю.Ф. Структура и свойства металлов и сплавов. Тепловые свойства металлов и сплавов. Киев: Наукова думка, 1985, 437 с.
20. Дриц М.Е., Будберг П.Б., Бурханов Г.С., Дриц А.М., Пановко В.М. Свойства элементов. Справочник. М.: Металлургия, 1985, 672 с.
21. Кириллов П.Л., Денискина Н.Б. Теплофизические свойства жидкометаллических теплоносителей (справочные таблицы и соотношения). Обзор, ФЭИ-0291. М.: ЦНИИАтоминформ, 2000, 42 с.

22. Новицкий Л.А., Кожевников И.Г. Теплофизические свойства материалов при низких температурах. Справочник. М.: Машиностроение, 1975, 216 с.
23. Рябухин А.Г. Линейный коэффициент термического расширения металлов. *Известия Челябинского Научного Центра*. 1999;3:15–17.
24. Белов Г.В., Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А., Морозов И.В. Опыт создания теплофизических баз данных с использованием современных информационных технологий (обзор). *Теплофизика высоких температур*. 2020;58(4):615–633. DOI: <https://doi.org/10.31857/S0040364420040018>
25. Сеченов П.А., Рыбенко И.А. База данных и программа для определения термодинамических свойств индивидуальных веществ. *Информатика и системы управления*. 2022;1(71):17–26. DOI: https://doi.org/10.22250/18142400_2022_71_1_17
26. Терехов С.В. Термодинамическая модель размытого фазового перехода в металлическом стекле $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$. *Физика и техника высоких давлений*. 2018;28(1):54–61.
27. Терехов С.В. Расчет базисной линии теплоемкости вещества в модели двухфазной области при отсутствии фазовых и других переходов. *Неорганические материалы*. 2023;59(4):468–472. EDN: VUNRRA. DOI: <https://doi.org/10.31857/S0002337X23040127>
28. Терехов С.В. Прогнозирование теплофизического поведения аморфных сплавов $Ni_{0.333}Zr_{0.667}$ и $La_{80}Al_{20}$ по свойствам металлов. *Расплавы*. 2023;5:479–490. EDN: VTDPRY. DOI: <https://doi.org/10.31857/S0235010623050109>
29. Терехов С.В. Теплофизические свойства металлов в квазидвухфазной модели. *Физика металлов и металловедение*. 2023;124(12):1261–1270. EDN: ZHWYVT. DOI: <https://doi.org/10.31857/S0015323023601666>
30. Терехов С.В. Тепловые свойства металлов. Справочник. Донецк: ДонФТИ им. А.А. Галкина, 2023, 184 с.
31. Терехов С.В. Расчет теплоемкостей сложных оксидов. *Вестник НовГУ*. 2024;1(135):31–42. DOI: [https://doi.org/10.34680/2076-8052.2024.1\(135\).31-42](https://doi.org/10.34680/2076-8052.2024.1(135).31-42)
32. Кингери У.Д. Введение в керамику. М.: Стройиздат, 1967, с. 325. [Kingery W.D. Introduction to ceramics. New York, London. John Wiley & Sons, Inc., 1960, 808 p.]
33. База данных по теплофизическим свойствам жидкометаллических теплоносителей перспективных ядерных реакторов. Теплофизические свойства жидкого эвтектического сплава натрия с калием 56%K+44%Na. URL: <https://gsssd-rosatom.mephi.ru/DB-tp-01/K-56-Na-44.php?ysclid=lwvzeyeizb726245407> (дата обращения 01.06.2024).
34. Stølen S., Grande T. Chemical thermodynamics of materials: macroscopic and microscopic aspects. Chichester West Sussex. John Wiley & Sons Ltd, The Atrium. 2004, 396 p.
35. Физические величины. Справочник. Под. ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991, 1232 с.
36. Шелудяк Ю.Е., Кашпоров Л.Я., Малинин Л.А., Цалков В.Н. Теплофизические свойства компонентов горючих систем. Справочник. М.: НПО Информация и технико-экономические исследования, 1992, 184 с.

Поступила в редакцию 26.06.2024

После доработки 11.11.2024

Принята к опубликованию 06.02.2025

Автор

Терехов Сергей Владимирович, ведущий научный сотрудник, д.ф.-м.н.,

E-mail: svlter@yandex.ru

UDC 536+669.017.53+621.039

Semi-Empirical Predictive Calculation of the Thermal-Physical Properties of Potassium-Sodium Melts Based on their Component Data

Terekhov S.V.

A.A. Galkin Donetsk Institute of Physics and Technology,
72 Rosa Luxemburg St., 283048 Donetsk, DPR, Russia

Abstract

Use of liquid-metal coolants in nuclear power plants has been the cause of unending interest in thermal-physical properties of metals and their alloys from both experimentalists and theorists. Power polynomials are used by experimentalists to approximate temperature changes in heat capacity, the coefficient of thermal linear (volume) expansion and other quantities. These polynomials have different form in different temperature intervals and need to be joined at the interval ends. This approach creates a number of difficulties in developing a unified methodology for calculating not only the thermal functions of metals, but also for predicting the behavior of their melts and alloys. The following was used in the paper to solve the problem at hand: the author's model of a two-phase local-equilibrium region (with different order parameters) and the modified rule of component mixing, taking into account the coordinated arrays of experimental data on the initial metals for calculating predictively the thermal-physical performance of potassium and sodium melts. It has been shown that using the model of a two-phase local-equilibrium region, new approximating functions and empirical formulas leads to a sufficiently adequate estimation of heat capacities, thermal linear expansion coefficients, densities, thermal conductivities and thermal diffusivities of melts. A discrepancy has been found between the mathematical description of the thermal conductivity of the $K_{56}Na_{44}$ melt and its experimental values.

Keywords: liquid-metal coolant, mixing rule, heat capacity, coefficient of thermal linear expansion, density, thermal conductivity, thermal diffusivity.

For citation: Terekhov S.V. Semi-Empirical Predictive Calculation of Thermophysical Properties of Potassium-Sodium Melts Based on their Component Data. *Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika*. 2025;1:37–50. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2025.1.03> (in Russian).

References

1. Novikov I.I., Soloviev A.N., Khabakhpasheva E.M., Gruzdev V.A., Pridantsev A.I., Vasenina M.Ya. Heat transfer and thermophysical properties of molten alkali metals. *The Soviet Journal of Atomic Energy*. 1956;1:545–560. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01479856>
2. Kirillov P.L., Troianov M.F. About one error in the values of heat capacity of sodium-potassium alloys. *The Soviet Journal of Atomic Energy*. 1958;5:1402. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01506474>
3. Rudnev I.I., Lyashenko V.S., Abramovich M.D. Diffusivity of sodium and lithium. *The Soviet Journal of Atomic Energy*. 1961;11:877–880. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01491184>
4. Subbotin V.I., Ivanovsky M.N., Arnoldov M.N. *Physicochemical bases of application of liquid metallic heat carriers*. Moscow. Atomizdat Publ., 1970, 296 p. (in Russian).

5. Alekseev V.A., Andreev A.A., Prokhorenko V.Ya. Electric properties of liquid metals and semiconductors. *Soviet Physics Uspekhi*. 1972;15(2):139–158. DOI: <https://doi.org/10.1070/PU1972v015n02ABEH004959>
6. Kirillov P.L., Yuryev Yu.S., Bobkov V.P. *Reference book on thermal-hydraulic calculations (nuclear reactors, heat exchangers, steam generators)*. Moscow. Energoatomizdat Publ., 1990, 360 p. (in Russian).
7. Kirillov P.L., Bogoslovskaya G.P. *Heat exchange in nuclear power installations*. Moscow. Energoatomizdat Publ., 2000, 456 p. (in Russian).
8. Rachkov V.I., Arnoldov M.N., Efanov A.D., Kalyakin S.G., Kozlov F.A., Loginov N.I., Orlov Y.I., Sorokin A.P. Use of liquid metals in nuclear, thermonuclear power engineering and other innovative technologies. *Thermal Engineering*. 2014;61(5):337–347. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0040601514050085>
9. Fokin L.R., Kulyamina E.Yu. Density of liquid potassium at the saturation line: a brief history of 50 years. *Thermophysics of High Temperatures*. 2021;59(5):679–685. DOI: <https://doi.org/10.31857/S0040364421050057> (in Russian).
10. Kuzina Yu.A., Sorokin A.P., Delnov V.N., Denisova N.A., Sorokin G.A. Thermal-hydraulic studies of the alkaline liquid-metal coolants in the substantiation of nuclear power installations. *Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika*. 2022;2:49–61. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2022.2.05> (in Russian).
11. Sorokin A.P., Kuzina Yu.A., Askhadullin R.Sh., Alekseev V.V. Investigations of physico-chemistry and technology of alkaline liquid-metal heat carriers for nuclear and thermonuclear power plants. *Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika*. 2022;3:5–17. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2022.3.01> (in Russian).
12. Lyakishev N.P., Bannykh O.A., Rokhlin L.L. et al. *State diagrams of double metal-lithium systems*. Reference Book: In 3, vol. 3, Book I. Under general Ed. by N.P. Lyakishev. Moscow. Mashinostroenie Publ., 2001, 872 p. ISBN 5-217-02843-2 (vol. 3) (in Russian).
13. Livshits B.G., Kraposhin V.S., Lipetsky Y.L. *Physical properties of metals and alloys*. Moscow. Metallurgy Publ., 1980, 320 p. (in Russian).
14. Grimvall G. *The Electron-phonon Interaction in Metals*. Amsterdam; New York; Oxford: North-Holland, 1981, 304 p.
15. Koshman V.S. About one approach to generalization of experimental data on thermal properties of elements of the Periodic System of D.I. Mendeleev. *Perm agrarian bulletin*. 2014;2(6):35–42 (in Russian).
16. Kaganov M.I., Lifshits I.M. *Quasiparticles (ideas and principles of quantum physics of solid state)*. Moscow. Nauka Publ., 1976, 80 p. (in Russian).
17. Brandt N.B., Kulbachinsky V.A. *Quasiparticles in condensed state physics*. Moscow. Fizmatlit Publ., 2005, 632 p. ISBN 5-9221-0564-7 (in Russian).
18. Zinoviev V.E. *Thermophysical properties of metals at high temperatures*. Moscow. Metallurgy Publ., 1989, 384 p. (in Russian).
19. Larikov L.N., Yurchenko Y.F. *Structure and properties of metals and alloys. Thermal properties of metals and alloys*. Kiev. Naukova dumka Publ., 1985, 437 p. (in Russian).
20. Drits M.E., Budberg P.B., Burkhanov G.S., Drits A.M., Panovko V.M. *Properties of elements. Reference book*. Moscow. Metallurgy Publ., 1985, 672 p. (in Russian).
21. Kirillov P.L., Denisikina N.B. *Thermophysical properties of liquid-metal coolants (reference tables and relations)*. Review, FEI-0291. Moscow. Tsniiatominform Publ., 2000, 42 p. (in Russian).
22. Novitskiy L.A., Kozhevnikov I.G. *Thermophysical properties of materials at low temperatures*. Reference book. Moscow. Mashinostroenie Publ., 1975, 216 p. (in Russian).

23. Ryabukhin A.G. Linear coefficient of thermal expansion of metals. *Izvestiya Chelyabinskogo Nauchnogo Tsentra*. 1999;3:15–17 (in Russian).
24. Belov G.V., Erkimbaev A.O., Zitserman V.Yu., Kobzev G.A., Morozov I.V. Experience in creating thermophysical databases using modern information technologies (review). *High Temperature*. 2020;58(4):615–633. DOI: <https://doi.org/10.31857/S0040364420040018> (in Russian).
25. Sechenov P.A., Rybenko I.A. Database and program for determination of thermodynamic properties of individual substances. *Informatics and Control Systems*. 2022;1(71):17–26. DOI: https://doi.org/10.22250/18142400_2022_71_1_17 (in Russian).
26. Terekhov S.V. Thermodynamic model of the blurred phase transition in metallic glass $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$. *High-pressure physics and engineering = Fizika i Tekhnika Vysokih Davlenij*. 2018;28(1):54–61 (in Russian).
27. Terekhov S.V. Calculation of the heat capacity baseline in a model of a two-phase region in the absence of phase transformations and other transitions. *Inorganic Materials*. 2023;59(4):452–456. DOI: <https://doi.org/10.1134/S002016852304012X>
28. Terekhov S.V. Prediction of the thermophysical behavior of amorphous alloys $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ and $\text{La}_{80}\text{Al}_{20}$ using the properties of the metals. *Russian Metallurgy (Metally)*. 2023;8:1105–1111. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0036029523080281>
29. Terekhov S.V. Thermophysical properties of metals in quasi two-phase model. *Physics of Metals and Metallography*. 2023;124(12):1293–1302. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0031918X23602196>
30. Terekhov S.V. *Thermal properties of metals. Reference book*. Donetsk. Galkin DonFTI Publ., 2023, 184 p. (in Russian).
31. Terekhov S.V. Calculation of heat capacities of complex oxides. *Vestnik NovSU*. 2024;1(135):31–42. DOI: [https://doi.org/10.34680/2076-8052.2024.1\(135\).31-42](https://doi.org/10.34680/2076-8052.2024.1(135).31-42) (in Russian).
32. Kingery W.D. Introduction to ceramics. Moscow. Stroyizdat Publ., 1967, p. 325 (in Russian). [Kingery W.D. Introduction to ceramics. New York, London: John Wiley & Sons, Inc., 1960, 808 p.]
33. Database on thermophysical properties of liquid-metallic coolants of advanced nuclear reactors. Thermophysical properties of liquid eutectic alloy of sodium with potassium 56%K+44%Na. URL: <https://gsssd-rosatom.mephi.ru/DB-tp-01/K-56-Na-44.php?ysclid=lvvzeyeizb726245407> (accessed Jun. 01, 2024) (in Russian).
34. Stølen S., Grande T. Chemical thermodynamics of materials: macroscopic and microscopic aspects. Chichester West Sussex. John Wiley & Sons Ltd, The Atrium, 2004, 396 p.
35. Physical quantities. Guide [Fizicheskie velichiny. Spravochnik]. Ed. I.S. Grigor'eva, E.Z. Mejlikhova. Moscow, Energoatomizdat, 1991, 1232 p. (in Russian).
36. Sheludyak Y.E., Kashporov L.Y., Malinin L.A., Tsalkov V.N. Thermophysical properties of components of combustible systems. Reference book. Moscow. NPO Information and Technical and Economic Research Publ., 1992, 184 p. (in Russian).

Author

Sergey V. Terekhov, leading researcher, Dr. Sci. (Phys.-Math.),
E-mail: svlter@yandex.ru