

DOI: 10.15643/vnpm-2023-58

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЕРХЛОРАТА ЛИТИЯ НА СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА РАСТВОРОВ ТЕТРАСУЛЬФИДОВ ЛИТИЯ В СУЛЬФОЛАНЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Юсупова А.Р.¹, Кузьмина Е.В.¹, Колосницын В.С.²

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, лаборатория новых материалов для электроэнергетики, Уфа, Россия

²Уфимский институт химии УФИЦ РАН, отдел электрохимической энергетики, Уфа, Россия

e-mail: alfia_yusupova@mail.ru

Методом классической молекулярной динамики проведено исследование влияния присутствия фоновой соли на физико-химические свойства и строение сольватной оболочки катиона лития в растворах тетрасульфида лития в сульфолане и 1М LiClO₄ в сульфолане (SL). Рассчитаны изотермы координационных чисел катиона лития, плотности, удельной электропроводности растворов тетрасульфида лития в сульфолане и в 1М LiClO₄ в сульфолане в диапазоне концентраций Li₂S₄ 0.2-2.5М.

В растворах Li₂S₄ в SL рассчитанные координационное число (КЧ) катиона лития по сульфолану уменьшаются линейно с увеличением концентрации соли с 3.2 до 1.7. КЧ катиона лития по аниону тетрасульфида увеличивается линейно с ростом концентрации соли с 2.4 до 4. В присутствии LiClO₄ КЧ катиона лития по сульфолану и аниону тетрасульфида с увеличением концентрации Li₂S₄ меняется по логарифмической зависимости с 4.2 до 2.2 и с 0.6 до 3.0, соответственно. С увеличением концентрациям Li₂S₄ КЧ катиона лития по аниону перхлората увеличивается с 0.01 до 0.1. Общее координационное число катиона лития не зависит от концентрации тетрасульфида лития и составляет порядка 5.5 в растворах Li₂S₄ в SL и 5.05 – растворах Li₂S₄ в 1М LiClO₄ в сульфолане.

Введение перхлората лития в раствор приводит к увеличению плотности и удельной электропроводности (рисунок).

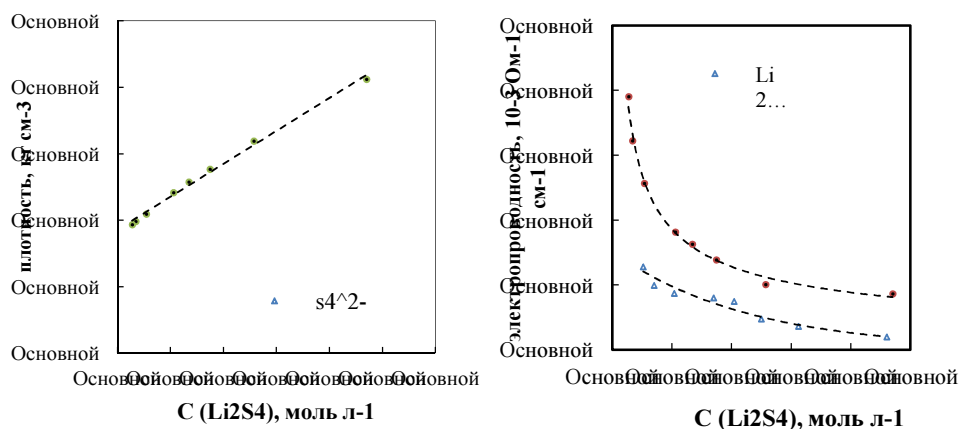


Рисунок - Зависимость плотности (а) и удельной электропроводности (б) растворов тетрасульфида лития в сульфолане и тетрасульфида лития в 1М LiClO₄ в сульфолане.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (совместный проект с Государственным фондом естественных наук Китая, NSFC), проект RSF-NSFC №21-43-00006).