**Термодинамическое моделирование
многокомпонентной системы H2O – Na2HPO4 – K2HPO4**

***Новиков А.А.***

*Аспирант, 4 год обучения*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва*

*E-mail:* *novikov.chem@gmail.com*

Двузамещённые фосфаты натрия и калия (M2HPO4, M = Na, K) широко используются в различных отраслях промышленности и входят в состав многих продуктов. В частности, гидрофосфат калия является важным компонентом комплексных PK‑удобрений, а гидрофосфат натрия применяется не только в сельском хозяйстве, но и в пищевой и химической промышленностях. В последние годы также возрос интерес к гидратам фосфатов и их смесям как перспективным теплоаккумулирующим материалам [1].

Оптимизация процессов с участием M2HPO4 и поиск новых теплоаккумуляторов требуют термодинамического моделирования свойств фаз и фазовых равновесий в системе H2O – Na2HPO4 – K2HPO4.

Моделирование растворов M2HPO4 затрудняется наличием множества химических равновесий. Анион HPO42- в водных растворах подвергается частичным диссоциации и гидролизу, что приводит к образованию анионов PO43- и H2PO4-. Это обуславливает необходимость учёта множественных ион-ионных взаимодействий.

Целью настоящей работы является построение комплексной термодинамической модели системы H2O – Na2HPO4 – K2HPO4 и её бинарных подсистем в широком диапазоне температур и концентраций.

В основе модели жидкой фазы лежит комбинация модели Питцера-Симонсона-Клегга (ПСК) для избыточных свойств и уравнения состояния Хелгесона-Киркхама-Фловерса для стандартных свойств ионов. Гибкость модели ПСК позволяет эффективно описывать растворы электролитов высокой концентрации, что особенно важно для описания поведения K2HPO4, растворимость которого при 373.15 К достигает 16.3 моль/кг.

Параметры растворимости твёрдых солей (∆*раствG*°) описаны с использованием полуэмпирических температурных зависимостей. Взаимодействия с участием анионов PO43- и H2PO4- рассчитывались с использованием параметров, ранее представленных, соответственно, в публикациях [2,3] и на конференции [4]. Этапы работы включали сбор литературных данных, моделирование бинарных подсистем H2O – M2HPO4 и трёхкомпонентной системы H2O – Na2HPO4 – K2HPO4. Расчёты выполнялись в среде MATLAB R2022a.

Разработанная модель успешно описывает термодинамические и термохимические свойства системы, а также фазовые равновесия в широком диапазоне концентраций и температур.

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 23-13-00138.*

**Литература**

1. Zou T. et al. Super absorbent polymer as support for shape-stabilized composite phase change material containing Na2HPO4·12H2O–K2HPO4·3H2O eutectic hydrated salt // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. 2021. Vol. 231. P. 111334.

2. Novikov A.A. et al. Thermodynamics of alkali metal orthophosphate water-salt systems. I. Dissociation constants and the H2O – K3PO4 system: Experimental study and modeling // J. Mol. Liq. 2024. Vol. 401. P. 124614.

3. Novikov A.A. et al. Thermodynamic Properties of H2O–Na3PO4 and H2O–Na3PO4–K3PO4 Systems: Experimental Study and Modeling // J. Chem. Eng. Data. 2025.

4. Novikov A.A., Knyazhenko G.A., Belova E.V. Thermodynamics and phase equilibria in the Na+, K+ // H2PO4-, Cl- – H2O system // XXIV International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia (RCCT-2024), July 1-5. Ivanovo, Russia, 2024. P. 130.