



DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2023.1.6>

УДК 537.266

ББК 22.334

Дата поступления статьи: 12.12.2022

Дата принятия статьи: 13.02.2023

## ИССЛЕДОВАНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВОДНОГО РАСТВОРА ИОДИДА ЛИТИЯ С УЧЕТОМ ОБОБЩЕННОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

**Рашидджон Саидвалибегович Махмадбегов**

Кандидат физико-математических наук, декан естественно-научного факультета,  
Российско-Таджикский (Славянский) университет  
Mah86Rashid@mail.ru  
<https://orcid.org/0000-0002-8234-0150>  
ул. Турсунзаде, 30, 734025 г. Душанбе, Таджикистан

**Аннотация.** На основе аналитических выражений для динамических коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\nu)$  и диэлектрических потерь  $\epsilon_2(\nu)$ , полученных ранее методом кинетических уравнений для растворов электролитов, с учетом вкладов обобщенного потенциала взаимодействия ионно-молекулярных систем, исследована частотная дисперсия этих коэффициентов и проведены численные расчеты в зависимости от температуры  $T$ , плотности  $\rho$  и концентрации  $C$  для растворов иодида лития. Полученные результаты численных расчетов находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными для водных растворов электролитов иодида лития.

**Ключевые слова:** коэффициенты диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь, коэффициенты трения, времена релаксации, потенциальная энергия взаимодействия, радиальная функция распределения.

## Введение

Известно, что структура воды и водных растворов электролитов с физико-химической точки зрения определяются пространственно-временным распределением структурных единиц раствора и их взаимодействия. На структуру растворителя влияют специфические особенности распределения и взаимодействия ионов растворимого вещества, что приводит к изменению физико-химических параметров растворов [2; 7; 17; 20; 21]. Следовательно, свойства и структура водно-электролитных систем определяются пространственным расположением их структурных единиц, что важно для предварительного знания механических, тепловых, электрических, диэлектрических и магнитных свойств. Например, в первой области концентраций структура воды является матрицей, на которой развиваются взаимодействия в растворах [5; 6]. В этом случае в единой структуре наблюдаются геометрические и объемные соответствия конфигураций ионов и растворенных молекул. В области высоких концентраций фрагменты гидратных сфер, ионные и водные кластеры комплементарно связаны между собой, что со структурных позиций создает условия повышенной смесимости компонентов. При этих концентрациях установлены и реализуются структурные переходы для большого числа модельных растворов. Они подтверждаются макроскопическими физико-химическими и микроскопическими методами, а также моделированием, методом молекулярной динамики (МД) и методом интегральных уравнений (ИУ) для модельных растворов, что наблюдается специфика концентрационного перехода водно-электролитных систем [23–25]. В этих работах установлены отличия диэлектрической проницаемости, время релаксации и активности воды растворов электролитов в разных концентрационных зонах. В рамках общей схемы рассмотрены закономерности, определяющие влияние структурно-кинетических изменений воды в разных концентрационных зонах растворов, а также на их термодинамические и диэлектрические свойства.

В работах [3; 4; 19] исследованы изменения комплексной диэлектрической проницаемости и релаксации водных растворов иодидов лития, калия и цезия в широком интервале изменений концентрации и температуры в области частотной дисперсии диэлектрической проницаемости воды. Изучены динамические коэффициенты диэлектрической проницаемости и потери этих растворов при изменении температуры от 288 до 323 К в интервале частот от 7 до 25 ГГц. Измерены их низкочастотная электропроводность и рассчитаны ионные потери на высоких частотах. В растворах наблюдается одна область релаксации, описываемая уравнениями Дебая или Коула — Коула. Также в работе [19] изучены зависимость времени диэлектрической релаксации  $\tau$  статической диэлектрической проницаемости  $\epsilon_s$  водного раствора электролита литий иодида от температуры и концентрации. Здесь отмечается, что время и энтальпия активации процесса диэлектрической релаксации уменьшаются при переходе от воды к растворам, что соответствует нарушению исходной структуры воды и повышенной подвижности молекул воды в гидратных оболочках ионов [19]. В начальной области концентраций наблюдается линейная зависимость активности воды от  $1/\epsilon_s$ . При высоких концентрациях статическая диэлектрическая проницаемость  $\epsilon_s$  растет с увеличением температуры. В связи с широким применением этих растворов в медицине и производстве фотореактивов, представляют большой интерес также теоретические исследования этих свойств водных растворов электролитов.

В работах [10; 13–16] методом кинетических уравнений получены аналитические выражения для коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\omega)$  и диэлектриче-

ских потерь  $\epsilon_1(\omega)$ , где в подынтегральных выражениях для потенциальных частей содержатся энергия взаимодействия  $\Phi_{ab}(r)$  и радиальная функция распределения  $g_{ab}^0(r)$ . На основе полуфеноменологической асимптотической модели раствора [20], которая описывается в приближении теории Мак-Миллана — Майера, где растворитель предполагается сплошной средой и в нем имеет место тепловое движение ионной подсистемы, проведены численные расчеты коэффициентов трения ионов  $\beta_a$ ,  $\beta_b$ , трансляционных  $\tau_a$ ,  $\tau_b$  и конфигурационному  $\tau_{ab}$  временам релаксации, а также коэффициентов  $\epsilon_1(\omega)$  и  $\epsilon_2(\omega)$  водных растворов LiCl, NaCl, KCl, CsCl и KF. Здесь вклад растворителя в значение коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\omega)$  и диэлектрических потерь  $\epsilon_2(\omega)$  водных растворов электролитов учитывается посредством статического значения коэффициентов диэлектрической проницаемости растворителя  $\epsilon_{ss}$ , а также коэффициентами трения  $\beta_a$  и  $\beta_b$  ионов сорта  $a$  и  $b$  [10; 13–16]. Однако согласно [1; 9; 11; 12; 20] энергия взаимодействия между структурными единицами ионно-молекулярных систем состоит из суммы межйонных, ионно-дипольных и диполь-дипольных потенциалов взаимодействия, которая учитывает их вклад в коэффициенты диэлектрической проницаемости и электропроводности растворов электролитов, что является важным.

Целью работы является проведение численных расчетов и изучение частотной дисперсии коэффициентов  $\epsilon_1(\nu)$  и  $\epsilon_2(\nu)$  с учетом вклада обобщенной энергии взаимодействия для водного раствора электролита иодида лития, в зависимости от температуры  $T$ , плотности  $\rho$  и концентрации  $C$  и частоты  $\nu$ .

### Основные выражения и выбор модели раствора

В работе [12] на основе обобщенного потенциала взаимодействия ионно-молекулярных систем, учитывающих в некоторых приближениях вклад ион-ионных, ион-молекулярных и межмолекулярных взаимодействий, исследованы частотная зависимость коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\nu)$  и диэлектрических потерь  $\epsilon_2(\nu)$  водного раствора калия иодида. Получены аналитические выражения коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\nu)$  и диэлектрических потерь  $\epsilon_2(\nu)$  с учетом обобщенного потенциала для ионно-молекулярных систем и проведены численные расчеты этих коэффициентов в зависимости от температуры  $T$ , плотности  $\rho$ , концентрации  $C$  и частоты  $\nu$  для растворов иодида калия, а также построены диаграммы Коула — Коула.

В качестве исходного принимаем аналитические выражения коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\omega)$  и диэлектрических потерь  $\epsilon_2(\omega)$  с учетом обобщенного потенциала ионно-молекулярных систем, когда потоки затухают по экспоненциальному закону, которые получены в [12] и имеют следующий вид:

$$\epsilon_1(\omega) = \epsilon_\infty + \sum_a \frac{\sigma_a^0 \tau_a}{\epsilon_0(1 + (\omega\tau_a)^2)} \left[ 1 + \sum_b \frac{(1 - (\omega\tau_a)^2 \frac{\tau_{ab}}{\tau_a})}{1 + (\omega\tau_a)^2 (\frac{\tau_{ab}}{\tau_a})^2} A_{ab}(0) \right], \quad (1)$$

$$\epsilon_2(\omega) = \sum_a \frac{(\omega\tau_a) \sigma_a^0 \tau_a}{\epsilon_0(1 + (\omega\tau_a)^2)} \left[ 1 + \sum_b \frac{(1 + \frac{\tau_{ab}}{\tau_a})}{1 + (\omega\tau_a)^2 (\frac{\tau_{ab}}{\tau_a})^2} A_{ab}(0) \right], \quad (2)$$

где

$$A_{ab}(0) = 2\pi \times n_b^* q_{ab} \int_0^\infty \left[ \frac{\partial^2 \Phi_{ab}^*(r)}{\partial r^2} - \frac{\partial^2 U_{ab}^*(r)}{\partial r^2} L(U_{ab}^*(r)) \right] \frac{sh(U_{ab}^*(r))}{U_{ab}^*(r)} g_{ab}^0(r) r^2 dr, \quad (3)$$

$$\tau_a = \frac{m_a}{2\beta_a}, \tau_b = \frac{m_b}{2\beta_b}, \tau_{ab} = \frac{d_{ab}^2}{kT} \frac{\beta_a \beta_b}{(\beta_a + \beta_b)}, \quad (4)$$

а  $\Phi_{ab}^*(r, \theta, \varphi) = \frac{\Phi_{ab}(r, \theta, \varphi)}{kT}$  и  $\Phi_{ab}(r, \theta, \varphi)$  — обобщенная потенциальная энергия взаимодействия ионно-молекулярных систем,  $\Phi_{ab}(r, \theta) = \Phi_{ab}^0(r) + \sum_{i=1}^2 U_{is}(r, \theta) + U_{ss}(r, \theta)$ ,  $\Phi_{ab}^0(r) = \Phi_{ab}^{LJ}(r) + \Phi_{ab}^D(r)$ ,  $\Phi_{ab}^{LJ}(r) = \frac{4\epsilon_{ab}}{\epsilon_{ss}}(r^{-12} - r^{-6})$  — потенциальная энергия Леннарда — Джонса;  $\Phi_{ab}^D(r) = \frac{R_{ab}}{r} e^{\chi^* r}$  — потенциальная энергия Дебая;  $\epsilon_{ab} = (\epsilon_{aa}\epsilon_{bb})^{\frac{1}{2}}$  — глубина потенциальной ямы энергии межчастичного взаимодействия;  $R_{ab} = \frac{f z_a z_b e^2 e^{\chi^*}}{\epsilon_{ab} d_{ab} (1 + \chi^*)}$ ,  $\chi^* = \chi_{ab} d_{ab}$  — приведенный обратный дебаевский радиус экранировки, в котором согласно [22]  $\chi$  определяется в виде  $\chi^2 = \sum_a \frac{n_a e_a^2}{\epsilon_{ss} \epsilon_0 kT}$ , а  $U_{ab}(r, \theta, \varphi)$  — потенциальной энергией взаимодействия диполей;  $U_{ab}^*(r) = \frac{(U_{is}(r) + U_{ss}(r))}{kT}$ ,  $U_{is}(r) = \frac{f(z_a + z_b) e \mu}{\epsilon_{ss} d_{ab}^2} \frac{1}{r^2}$  — потенциальная энергия ион-дипольного взаимодействия;  $U_{ss}(r) = \frac{f \mu^2}{\epsilon_{ss} d_{ab}^3} \frac{1}{r^3}$  — потенциальная энергия диполь-дипольного взаимодействия;  $L(U_{ab}^*(r)) = [\text{cth } U_{ab}^*(r) - \frac{1}{U_{ab}^*(r)}]$  — функции Ланжевена,  $\text{sh}(U_{ab}^*(r))$  и  $\text{cth } U_{ab}^*(r)$  — гиперболические функции;  $\epsilon_{ss}$  — коэффициент диэлектрической проницаемости растворителя;  $d_{ab} = \frac{(d_{aa} + d_{bb})}{2}$ ,  $f = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ ;  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная;  $\mu$  — электрический момент молекулы-диполя и  $\mu^2 = \mu_s \mu_s$ ;  $g_{ab}^0(r)$  — радиальная функция распределения, которая согласно [20]  $g_{ab}^0(r) = y(r, \rho^*) e^{-\frac{\Phi_{ab}^0(r)}{kT}}$ ;  $y(r, \rho^*)$  — бинарная функция распределения двух полостей, где ограничимся ее контактным значением  $y(r, \rho^*) \approx y(\rho^*)$  на расстоянии  $r = 1$  ( $r_{ab} = d_{ab}$ ), полученная Карнаханом — Старлингом в виде  $y(\rho^*) = \frac{(2 - \rho^*)}{2(1 - \rho^*)^3}$ ,  $\rho^* = \frac{\pi n d_{ab}^3}{6} = \frac{\pi \rho d_{ab}^3 N_0}{6M}$  — приведенная плотность;  $\rho$  — плотность раствора;  $N_0$  — число Авогадро;  $M$  — молярная масса;  $\sigma_a^0 = \frac{n_a e_a^2 \tau_a}{m_a}$ ,  $n_b^* = \frac{\pi}{6} n_b d_{ab}^3$ ,  $q_{ab} = \frac{4(\epsilon_a \beta_b - \epsilon_b \beta_a)}{\pi \epsilon_a (\beta_a + \beta_b)}$ ,  $m_a, m_b$  — массы;  $e_a, e_b$  — заряды;  $n_a, n_b$  — числовые плотности;  $d_a, d_b$  — диаметры;  $\beta_a, \beta_b$  — коэффициенты трения ионов сорта  $a$  и  $b$ ;  $e$  — элементарный заряд;  $z_a, z_b$  — валентность ионов;  $\tau_a, \tau_b$  и  $\tau_{ab}$  — времена релаксации в импульсном и конфигурационном пространстве;  $\vec{r}_{ab} = \vec{q}_b - \vec{q}_a$  — взаимное расстояние;  $r = \frac{r_{ab}}{d_{ab}}$  — приведенное расстояния между ионами сорта  $a$  и  $b$ ;  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная;  $k$  — постоянная Больцмана;  $T$  — абсолютная температура;  $\omega = 2\pi\nu$  — циклическая частота;  $\nu$  — частота процесса;  $\epsilon_\infty$  — значение коэффициента диэлектрической проницаемости при  $\omega \rightarrow \infty$ .

В дальнейшем возникает необходимость учета малых параметров, то есть когда  $U_{ab}^*(r) = \frac{U_{ab}(r)}{kT} \ll 1$  и это всегда имеет место. Если обсудим даже по классической теории электропроводности, то исходя из представлений о свободных частицах (ионах) электролитов предполагается, что ионы проводимости в электролитах ведут себя подобно молекулам идеального газа. В промежутках между соударениями они движутся совершенно свободно и эти столкновения приводят к установлению теплового равновесия системы (полуфеноменологическая осмотическая модель раствора, которая согласно [1; 3–7; 9–16; 18–25; 25] описывается в приближении теории Мак-Миллана — Майера). Отсюда, для упрощения этих выражений учитываем условия малых параметров, разлагая в подынтегральных выражениях функции Ланжевена  $L(U_{ab}^*(r))$  и гиперболические функции  $\text{sh}(U_{ab}^*(r))$  и  $\text{cth } U_{ab}^*(r)$  в ряд и ограничиваясь линейными членами. Тогда выражение (3) принимает следующий вид:

$$A_{ab}(0) = 2\pi \times n_b^* q_{ab} \int_0^\infty \left[ \frac{\partial^2 \Phi_{ab}^0(r)}{\partial r^2} - \frac{\partial^2 U_{ab}^*(r)}{\partial r^2} \frac{U_{ab}^*(r)}{3} \right] g_{ab}^0(r) r^2 dr. \quad (5)$$

Таким образом, формулы (1) и (2) в контексте (5) позволяют исследовать частотную дисперсию коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\nu)$  и диэлектрических потерь  $\epsilon_2(\nu)$  с учетом обобщенного потенциала ионно-молекулярных систем в зависимости от термодинамических параметров состояния. Как и в работах [1; 9; 11; 12], в этих выражениях потенциальные члены определяются обобщенным потенциалом энергии взаимодействия, который состоит из суммы межйонных, ион-молекулярных и межмолекулярных потенциалов взаимодействия, а также радиальной функции распределения  $g_{ab}^0(r)$ , и при определенном выборе модели раствора эти равновесные структурные параметры известны в литературе. В дополнение к сказанному вклад растворителя в коэффициенты диэлектрических параметров учитывается посредством статического коэффициента диэлектрической проницаемости растворителя  $\epsilon_{ss}$ , коэффициентами трения  $\beta_a, \beta_b$  ионов сорта  $a$  и  $b$ .

Для проведения численных расчетов коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\omega)$  и диэлектрических потерь  $\epsilon_2(\omega)$  водного раствора электролита иодида лития с учетом обобщенного потенциала взаимодействия наряду с известными молекулярными параметрами  $m_i, e_i, n_i, d_i$  ( $i = a, b$ ) еще понадобится определение коэффициентов трения  $\beta_a, \beta_b$  трансляционных  $\tau_a, \tau_b$  и конфигурационному  $\tau_{ab}$  временам релаксации.

Далее аналогично коэффициентам диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\omega)$  и диэлектрических потерь  $\epsilon_2(\omega)$  при вышеприведенных условиях в [12] для выражения коэффициентов трения  $\beta_a, \beta_b$  частиц сорта  $a$  и  $b$  получены следующие выражения:

$$\beta_a^2 = \sum_a \frac{4\pi}{3} \rho_a kT \sum_b d_{ab} \int_0^\infty \left[ \frac{\partial^2 \Phi_{ab}^{*0}(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Phi_{ab}^{*0}(r)}{\partial r} - L(U_{ab}^*(r)) \right] \times \\ \times \left[ \frac{\partial^2 U_{ab}^*(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial U_{ab}^*(r)}{\partial r} - \frac{2U_{ab}^*(r)}{r^2} \right] \frac{sh(U_{ab}^*(r))}{U_{ab}^*(r)} g_{ab}^0(r) r^2 dr, \quad (6)$$

$$\beta_b^2 = \sum_b \frac{4\pi}{3} \rho_b kT \sum_a d_{ab} \int_0^\infty \left[ \frac{\partial^2 \Phi_{ab}^{*0}(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Phi_{ab}^{*0}(r)}{\partial r} - L(U_{ab}^*(r)) \right] \times \\ \times \left[ \frac{\partial^2 U_{ab}^*(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial U_{ab}^*(r)}{\partial r} - \frac{2U_{ab}^*(r)}{r^2} \right] \frac{sh(U_{ab}^*(r))}{U_{ab}^*(r)} g_{ab}^0(r) r^2 dr, \quad (7)$$

которые также полностью учитывают вклады взаимодействия структурных единиц, то есть межйонные, ионно-молекулярные и межмолекулярные взаимодействия.

Следует отметить, что для проведения численных расчетов полученные выражения коэффициентов трения  $\beta_a, \beta_b$  в виде (5) являются сложными. Поэтому, как выше, разлагая в подынтегральных выражениях функции Ланжевена  $L(U_{ab}^*(r))$  и гиперболические функции  $sh(U_{ab}^*(r))$  и  $cthU_{ab}^*(r)$  в ряд и ограничиваясь линейными членами, получим аналитическое выражение коэффициентов трения  $\beta_a, \beta_b$  в следующем виде [12]:

$$\beta_a^2 = \sum_a \frac{4\pi}{3} \rho_a kT \sum_b d_{ab} \int_0^\infty \left[ \frac{\partial^2 \Phi_{ab}^{*0}(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Phi_{ab}^{*0}(r)}{\partial r} - \frac{U_{ab}^*(r)}{3} \right] \times \\ \times \left[ \frac{\partial^2 U_{ab}^*(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial U_{ab}^*(r)}{\partial r} - \frac{2U_{ab}^*(r)}{r^2} \right] g_{ab}^0(r) r^2 dr, \quad (8)$$

$$\beta_b^2 = \sum_b \frac{4\pi}{3} \rho_b kT \sum_a d_{ab} \int_0^\infty \left[ \frac{\partial^2 \Phi_{ab}^{*0}(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Phi_{ab}^{*0}(r)}{\partial r} - \frac{U_{ab}^*(r)}{3} \times \right. \\ \left. \times \left[ \frac{\partial^2 U_{ab}^*(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial U_{ab}^*(r)}{\partial r} - \frac{2U_{ab}^*(r)}{r^2} \right] \right] g_{ab}^0(r) r^2 dr. \quad (9)$$

Следует отметить, что в выражениях (3), (5)–(9) расстояния между структурными единицами раствора характеризуются через приведенное расстояние  $r = \frac{r_{ab}}{d_{ab}}$ , где  $\vec{r}_{ab} = \vec{q}_b - \vec{q}_a$  — межчастичное расстояние, а  $d_{ab} = \frac{(d_{aa} + d_{bb})}{2}$  — расстояния между центрами двух ионов раствора, когда столкновения считаются упругими ( $r = 1$  ( $r_{ab} = d_{ab}$ )) и при взаимодействии структурных единиц раствора центры двух частиц сближаются на этом приведенном расстоянии  $r$ . А если соударение между ними неупругое, то молекулы немного деформируются и это соответствует примерно  $0,9r$ . Отсюда предел интегрирования при расчетах дается примерно от  $0,85r$ – $0,95r$  (нижний предел) до  $10r$  (верхний предел), что соответствует тому, что расстояние между взаимодействующими частицами раствора  $10d_{ab}$ .

### Численные расчеты и обсуждение результатов

На основе формул (8) и (9) произведен численный расчет коэффициентов трения  $\beta_a$ ,  $\beta_b$ , а также согласно определению времен релаксации  $\tau_a$ ,  $\tau_b$  и  $\tau_{ab}$  ионов в зависимости от термодинамических параметров состояния. А потом с учетом численных расчетов этих коэффициентов трения и времен релаксации и на основе формул (1)–(2) и (5) рассчитаны частотные дисперсии коэффициентов  $\epsilon_1(\nu)$  и  $\epsilon_2(\nu)$  для водного раствора электролита иодида лития в зависимости от плотности  $\rho$ , концентрации  $C$ , температуры  $T$  и частоты  $\nu$ . Численные расчеты проведены программным пакетом «Mathematica 8». Полученные результаты приведены в виде таблиц и рисунков.

В таблице 1 отражены численные значения коэффициентов трения  $\beta_a$ ,  $\beta_b$ , времен релаксации  $\tau_a$ ,  $\tau_b$  и  $\tau_{ab}$ , а в таблицах 2–4 — коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\nu)$  и  $\epsilon_2(\nu)$  диэлектрических потерь водного раствора электролита иодида лития при температурах 283–353 К, в интервале изменения концентрации  $1 \leq C \leq 7$  моль/кг, плотности  $1107 \leq \rho \leq 1517$  кг/м<sup>3</sup> и диапазоне частот  $7,5 \leq \nu \leq 10^4$  ГГц. Проведены сравнения полученных теоретических результатов с экспериментальными данными работы [19]. Ход концентрационной, плотностной и частотной зависимости  $\epsilon_1(\nu)$  и  $\epsilon_2(\nu)$  соответствует экспериментальным результатам.

Известно, что диэлектрические свойства растворов электролитов характеризуются коэффициентами диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь, которые связаны релаксационными процессами в растворах. При оценке этих коэффициентов разные авторы используют разные выражения времени релаксации. Например, наши численные расчеты отличаются от других теоретических и экспериментальных данных тем, что при выборе модели раствора у нас имеются два времени релаксации (выражения 4), то есть трансляционное время релаксации ионов  $\tau_a$ ,  $\tau_b$  и конфигурационное (то есть «структурное») время релаксации  $\tau_{ab}$ , численные значения которых приведены в таблице 1 для температуры 298 К при разных концентрации и плотности.

Таблица 1

Численные расчеты коэффициентов трения ( $\beta_1, \beta_2$ ) и времен релаксации ( $\tau_1, \tau_2, \tau_{11}, \tau_{12}, \tau_{22}$ ) водного раствора LiI в зависимости от плотности  $\rho$  и концентрации  $C$  при  $T = 298$  К

$C$ , моль/кг	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$\beta_1$ , 10 <sup>-14</sup> кг/с	$\beta_2$ , 10 <sup>-14</sup> кг/с	$\tau_{[19]}$ , 10 <sup>-12</sup> с	$\tau_1$ , 10 <sup>-12</sup> с	$\tau_2$ , 10 <sup>-12</sup> с	$\tau_{11}$ , 10 <sup>-12</sup> с	$\tau_{12}$ , 10 <sup>-12</sup> с	$\tau_{22}$ , 10 <sup>-12</sup> с
1	1 107	1,187	6,138	7,1	0,490	1,718	0,122	0,331	1,505
2	1 208	1,705	9,063	6,2	0,341	1,164	0,176	0,478	2,221
3	1 273	1,998	10,755	5,7	0,291	0,981	0,206	0,561	2,636
4	1 342	2,291	12,467	5,3	0,254	0,846	0,236	0,644	3,056
5,5	1 439	2,691	14,824	5,0	0,216	0,712	0,277	0,758	3,634
7	1 517	3,005	16,685	5,1	0,193	0,632	0,309	0,848	4,090

Как видно из таблицы 1 и рисунка 1, коэффициенты трения и времен релаксации в конфигурационном пространстве ионов сорта  $a$  и  $b$  зависят от концентрации, и изотермически при увеличении концентрации возрастают. Однако зависимость трансляционная ( $\tau_1, \tau_2$ ) и диэлектрическая ( $\tau_2$ ) времена релаксации ионов, согласно численным расчетам и экспериментальным данным [19], по возрастанию концентрации и температуры уменьшается (см. рис. 2), что соответствует ранее полученным данным для других водных растворов [1; 9–16].

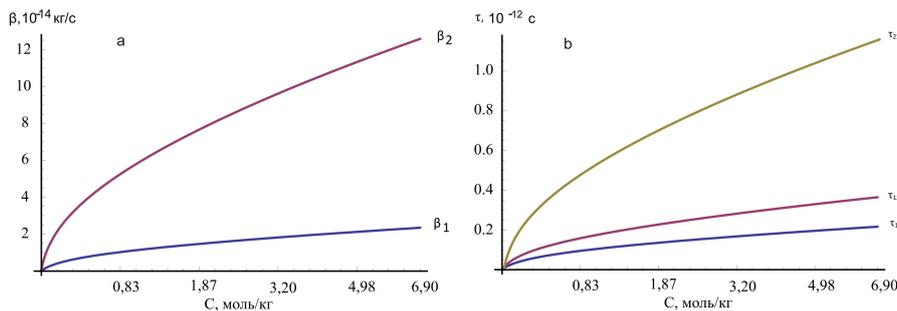


Рис. 1. Зависимость коэффициентов трения (a) и времени релаксации (b) ионов в конфигурационном пространстве от концентрации при температуре 298 К

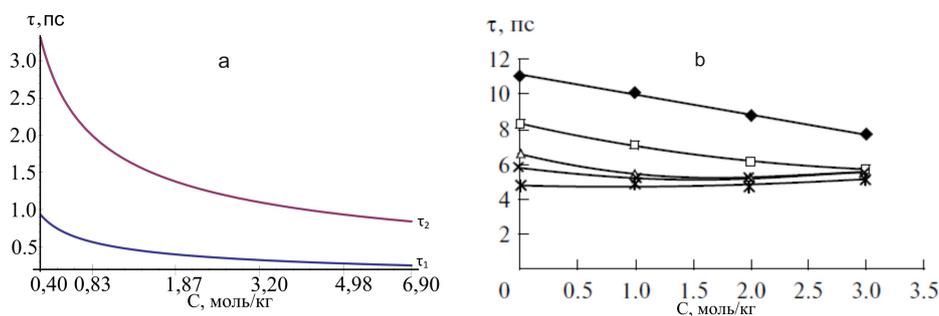


Рис. 2. Зависимость времени релаксации ионов водных растворов электролитов иодида лития от концентрации: а) трансляционных времен ( $\tau_1, \tau_2$ ) релаксации при температуре 298 К по численным расчетам; б) время ( $\tau_2$ ) диэлектрической релаксации при температурах  $\blacklozenge$ 288,  $\square$ 298,  $\triangle$  308,  $\times$ 313,  $\ast$ 323 К по данным [19]

Таблица 2

**Зависимость статического коэффициента диэлектрической проницаемости  $\epsilon_s$  водного раствора иодида лития от концентрации и температуры**

$T, K$	288	288	298	298	303	303	313	313	323	323
$C, \text{моль/кг}$	[19]	Расч.								
Вода	82,1		78,4		74,9		73,2		69,9	
1	67,8	62,95	63,0	60,58	61,0	59,44	59,5	57,25	57,5	55,18
2	55,1	55,25	52,4	53,19	51,6	52,21	50,5	50,32	49,8	48,54
3	45,8	50,22	44,7	48,37	45,2	47,48	45,6	45,77	44,7	44,17
4	38,6	44,83	38,5	43,18	40,2	42,40	41,4	40,91	40,1	39,49
5,5	30,9	37,08	32,7	35,74	35,3	35,10	35,4	33,90	35,8	32,77
7	27,0	30,80	28,9	29,69	31,8	29,17	31,9	28,23	33,5	27,31

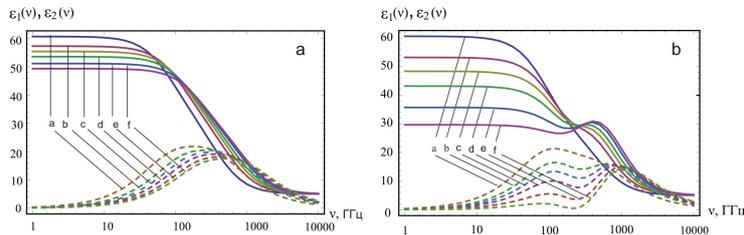


Рис. 3. Частотная зависимость коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\nu)$  (сплошная линия) и диэлектрических потерь  $\epsilon_2(\nu)$  (штриховая линия) водного раствора LiI при температуре 298 К и разных концентрациях:

$a$  — 1;  $b$  — 2;  $c$  — 3;  $d$  — 4;  $e$  — 5,5 и  $f$  — 7 моль/кг;

$a)$  без потенциальной части формулы (1)–(2);  $b)$  с учетом потенциальной части формулы (1)–(2)

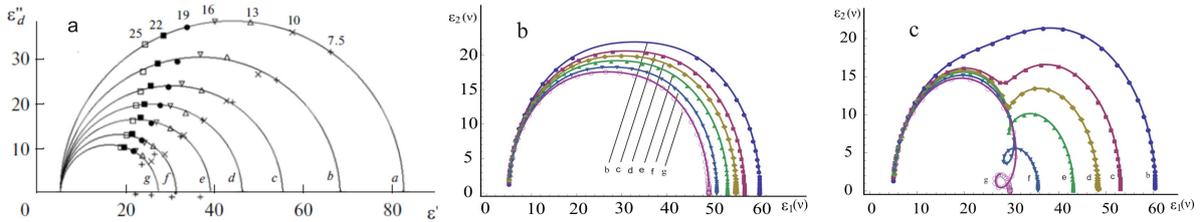


Рис. 4. Диаграмма Коула — Коула для водного раствора LiI при температуре 298 К и концентрации (моль/кг):  $a$  — 0 (вода);  $b$  — 1;  $c$  — 2;  $d$  — 3;  $e$  — 4;  $f$  — 5,5;  $g$  — 7.

$a)$  по данным [19];  $b)$  расчетные данные без потенциальной части формулы (1)–(2);

$c)$  расчетные данные с учетом потенциальной части формулы (1)–(2)

На рисунке 3 приведены частотная дисперсия коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\nu)$  и диэлектрических потерь  $\epsilon_2(\nu)$  водного раствора LiI при  $T = 298$  К и разных концентрациях, без учета потенциальной части ( $a$ ) в выражениях (1) и (2), которые соответствуют трансляционному движению ионов сорта  $a$  и  $b$ , также с учетом потенциальной части ( $b$ ), обусловленное взаимодействием ионов и диполей. Как видно из рисунка 3а, для  $\epsilon_1(\nu)$  и  $\epsilon_2(\nu)$  имеется одна область частотной дисперсии, приблизительно равной  $10^2$  Гц, а на рисунке 3б — две области дисперсии, обусловленные ионами и диполями. Аналогичное явление имеется на диаграмме Коула — Коула, где на рисунке 4б — одна область частотной дисперсии, а на рисунке 4с — две области, когда первая область относится к диполям, а вторая — к ионам.

Таблица 3

Зависимость изотермических коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\nu)$  и диэлектрических потерь  $\epsilon_2(\nu)$  водного раствора LiI от  $\rho$ ,  $C$  и  $\nu$  при  $C = 298$  К

C	$\nu, \Gamma\Gamma\text{ц}$	7.5		16		25		50		100		1000	
		$\epsilon_1$	$\epsilon_2$										
	$\rho$												
	кг/м <sup>3</sup>	[19]	Расч.	[19]	Расч.	[19]	Расч.	[19]	Расч.	Расч.	Расч.	Расч.	Расч.
1	1 107	56,2	60,35	43,4	59,54	6,51	30,5	58,15	9,80	52,47	16,59	40,98	21,22
2	1 208	46,8	53,07	2,03	38,9	52,65	4,28	51,89	6,53	48,52	11,70	40,04	16,33
3	1 273	40,7	48,28	1,60	35,1	47,96	3,37	47,38	5,16	44,78	9,35	37,90	13,26
4	1 342	35,7	43,12	1,22	31,4	42,87	2,57	42,44	3,94	40,44	7,14	35,09	10,07
5.5	1 439	30,7	35,69	0,73	27,9	35,54	1,54	35,26	2,35	33,99	4,21	30,72	5,61
7	1 517	27,6	29,67	0,35	24,6	29,58	0,73	29,42	1,11	28,73	1,90	27,14	2,08

Таблица 4

Зависимость динамических коэффициентов диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1(\nu)$  и диэлектрических потерь  $\epsilon_2(\nu)$  водного раствора LiI от  $\rho$ ,  $T$  и  $\nu$  при  $C = 1$  моль/кг

T	$\nu, \Gamma\Gamma\text{ц}$	7.5		16		25		50		100		1000	
		$\epsilon_1$	$\epsilon_2$										
	$\rho$												
	кг/м <sup>3</sup>	[19]	Расч.	[19]	Расч.	[19]	Расч.	[19]	Расч.	Расч.	Расч.	Расч.	Расч.
283	1 110		63,94	3,41	63,03	7,12	61,47	10,70	55,18	17,96	42,78	22,66	9,65
288	1 109	53,1	62,71	3,31	36,4	61,84	6,91	60,33	10,39	54,26	17,49	42,17	22,17
293	1 108		61,51	3,21		60,68	6,71	59,23	10,09	53,35	17,04	41,57	21,69
298	1 107	56,2	60,35	3,12	43,4	59,54	6,51	58,15	9,80	52,47	16,59	40,98	21,22
308	1 104	57,0	58,11	2,94	48,6	57,37	6,14	56,07	9,26	50,75	15,75	39,83	20,32
313	1 102	57,8	57,05	2,86	49,0	56,33	5,97	55,07	9,01	49,93	15,36	39,28	19,89
323	1 097	57,7	54,99	2,70	51,5	54,32	5,65	53,16	8,53	48,33	14,60	38,19	19,06
343	1 086		51,18	2,42		50,59	5,06	49,58	7,66	45,32	13,23	36,12	17,53
353	1 082		49,39	2,29		48,84	4,79	47,89	7,26	43,89	12,59	35,14	16,80

Как видно из таблицы 1 численных значений, время релаксации водного раствора иодида лития по данным [19], который по ходу изменения концентрации и плотности соответствует нашему трансляционному времени релаксации, приблизительно на 1 порядок больше. Например, у эксперимента равно  $\tau = 7,1$  пс (одну область дисперсии), а наша модель раствора  $\tau_1 = 0,49$  пс,  $\tau_1 = 1,718$  пс (за счет чего и появляется две области дисперсии) (см. рис. 3 и 4). Поэтому при выполнении условия  $\omega\tau = 2\pi\nu\tau = 1$ , которое называется условием максимума диэлектрических потерь или характерным временем релаксации, численные значения диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь на одну декаду опаздывают по частотам (см. табл. 3 и 4), то есть все расхождения связаны с выбранной нами моделью раствора с молекулярно-кинетической точки зрения. Видимо, если бы выбор нами модели раствора, то есть выражения времени релаксации совпадал с работой [19], то это расхождение было бы не очень существенным.

### Заключение

Следовательно, результаты численных расчетов при выбранной нами модели раствора, потенциал межмолекулярного взаимодействия  $\Phi_{ab}(r, \theta, \varphi)$  и радиальная функция распределения  $g_{ab}^0(r, \theta, \varphi)$  дали относительно удовлетворительное согласие теоретических и экспериментальных значений и для водного раствора LiI в широком интервале изменения параметров состояния. Частотная дисперсия и в широком диапазоне частот обусловлена наличием диэлектрической релаксации в водном растворе LiI, что является следствием вкладов молекулярных релаксационных процессов. В общем случае область частотной дисперсии коэффициентов  $\epsilon_1(\nu)$  и  $\epsilon_2(\nu)$  в зависимости от термодинамических параметров состояния составляет  $10^2$  Гц, что совпадает с результатами общей релаксационной теории и экспериментальными данными [8].

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Акдодов, Д. М. Исследование области частотной дисперсии коэффициентов вязкостей растворов электролитов с учетом обобщенного потенциала взаимодействия / Д. М. Акдодов // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. — 2017. — № 1-1. — С. 111–115.
2. Вопросы физической химии растворов электролитов / под ред. Г. И. Микулина. — Л. : Химия, 1968. — 420 с.
3. Кобелев, А. В. Диэлектрическая проницаемость и релаксация водных растворов иодида цезия / А. В. Кобелев, А. С. Лилеев, А. К. Лященко // Журн. неорган. химии. — 2011. — Т. 56, № 10. — С. 1746–1749.
4. Кобелев, А. В. Температурная зависимость СВЧ-диэлектрических свойств водных растворов иодида калия / А. В. Кобелев, А. С. Лилеев, А. К. Лященко // Журн. неорган. химии. — 2011. — Т. 56, № 4. — С. 697–704.
5. Лященко, А. К. Активность воды и диэлектрическая константа водных растворов электролитов / А. К. Лященко, И. М. Каратаева // Журн. физ. химии. — 2010. — Т. 84, № 2. — С. 376–384.
6. Лященко, А. К. Пространственная структура воды во всей области ближнего порядка / А. К. Лященко, Л. В. Дуняшев, В. С. Дуняшев // Журн. структур. химии. — 2006. — Т. 47, № 7. — С. S36–S53.
7. Лященко, А. К. Структурные и молекулярно-кинетические свойства концентрированных растворов и фазовые равновесия водно-солевых систем / А. К. Лященко

- // Концентрированные и насыщенные растворы. — М. : Наука, 2002. — С. 93–118.
8. Михайлов, И. Г. Основы молекулярной акустики / И. Г. Михайлов, В. А. Соловьев, И. Г. Сырников. — М. : Наука, 1964. — 514 с.
  9. Одинаев, С. Исследование частотной дисперсии динамических модулей упругости растворов электролитов на основе обобщенного потенциала ионно-молекулярных систем / С. Одинаев, Д. М. Акдодов, Н. Шарипов // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. — 2020. — № 1. — С. 118–130.
  10. Одинаев, С. Исследование частотной дисперсии коэффициента диэлектрической проницаемости растворов электролитов / С. Одинаев, Р. С. Махмадбегов // Журн. физ. химии. — 2016. — Т. 90, № 1. — С. 52–58.
  11. Одинаев, С. Исследование частотной дисперсии коэффициента удельной электропроводности водных растворов электролитов / С. Одинаев, Д. М. Акдодов, Х. И. Идибегзода // Журн. структур. химии. — 2019. — Т. 60, № 3. — С. 452–460.
  12. Одинаев, С. Исследование частотной дисперсии коэффициентов диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь водных растворов иодидов калия / С. Одинаев, Д. М. Акдодов, Р. С. Махмадбегов // Журн. структур. химии. — 2022. — Т. 63, № 6. — С. 826–837.
  13. Одинаев, С. Исследование частотной дисперсии коэффициентов диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь водного раствора иодида цезия / С. Одинаев, Р. С. Махмадбегов // Известия Национальной академии наук Таджикистана. Отделение физико-математических, химических, геологических и технических наук. — 2021. — Т. 182, № 1. — С. 39–49.
  14. Одинаев, С. Расчет частотных спектров коэффициентов диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь водных растворов электролитов / С. Одинаев, Р. С. Махмадбегов // Журн. физ. химии. — 2018. — Т. 92, № 1. — С. 107–114.
  15. Одинаев, С. Частотная дисперсия диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь водных растворов KCl и CsCl в зависимости от параметров состояния / С. Одинаев, Р. С. Махмадбегов // Укр. физ. журн. — 2015. — Т. 60, № 12. — С. 1212–1219.
  16. Одинаев, С. Численный расчет коэффициентов диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь водного раствора KF от параметров состояния / С. Одинаев, Р. С. Махмадбегов // Журн. структур. химии. — 2018. — Т. 59, № 3. — С. 621–628.
  17. Самойлов, О. Я. Структура водных растворов электролитов и гидратация ионов / О. Я. Самойлов. — М. : АН СССР, 1957. — 182 с.
  18. Смирнова, Н. А. Молекулярные теории растворов / Н. А. Смирнова. — Л. : Химия, 1987. — 336 с.
  19. Температурные изменения диэлектрической проницаемости и релаксации водных растворов иодида лития / А. К. Лященко, А. В. Кобелев, И. М. Каратаева, А. С. Лилеев // Журн. неорганич. химии. — 2014. — Т. 59, № 7. — С. 971–980.
  20. Юхновский, И. Р. Статистическая теория классических равновесных систем / И. Р. Юхновский, М. Ф. Головкин. — Киев : Наукова думка, 1980. — 372 с.
  21. Barthel, J. M. G. Physical Chemistry of Electrolyte Solution. Modern Aspects / J. M. G. Barthel, H. Krienke, W. Kunz. — Steinkopff; Darmstadt; New York : Springer, 1998. — 401 p.
  22. Krienke, H. Alkali metal halide solution in 1,4-dioxane – water mixtures. A Monte Carlo simulation study / H. Krienke, G. Krienke, J. M. G. Barthel // J. Molecular Liquids. — 2004. — Vol. 109. — P. 115–124.
  23. Lyashchenko, A. K. Dielectric Relaxation of Water in Hydration Shells of Ions / A. K. Lyashchenko, A. S. Lileev // J. Chem. Eng. Data. — 2010. — Vol. 55. — P. 2008–2016.
  24. Computer simulation study of rotational diffusion in polar liquids of different types / A. Y. Zasetsky, S. V. Petelina, A. K. Lyashchenko, A. S. Lileev // J. Chem. Phys. — 2010. — Vol. 133. — Article ID: 134502.
  25. Zasetsky, A. Ion–Ion and Ion–Water Aggregations and Dielectric Response of Aqueous Solutions of Li<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>: Molecular Dynamic Simulations Study / A. Zasetsky, A. Lyashchenko,

**REFERENCES**

1. Akdodov D.M. Issledovanie oblasti chastotnoy dispersii koeffitsientov vyazkostey rastvorov elektrolitov s uchetom obobshchennogo potentsiala vzaimodeystviya [Investigation of the Region of Frequency Dispersion of the Viscosity Coefficients of Electrolyte Solutions, Taking Into Account the Generalized Interaction Potential]. *Vestnik Tadzhikskogo natsionalnogo universiteta. Seriya estestvennykh nauk*, 2017, no. 1-1, pp. 111-115.
2. *Voprosy fizicheskoy khimii rastvorov elektrolitov* [Issues of Physical Chemistry of Electrolyte Solutions. G.I. Mikulin, ed.]. Leningrad, Khimiya Publ., 1968. 420 p.
3. Kobelev A.V., Lileev A.S., Lyashchenko A.K. Dielektricheskaya pronitsaemost i relaksatsiya vodnykh rastvorov iodida tseziya [Dielectric Permittivity and Relaxation of Aqueous Solutions of Cesium Iodide]. *Zhurn. neorgan. khimii*, 2011, vol. 56, no. 10, pp. 1746-1749.
4. Kobelev A.V., Lileev A.S., Lyashchenko A.K. Temperaturnaya zavisimost SVCh-dielektricheskikh svoystv vodnykh rastvorov iodida kaliya [Temperature Dependence of Microwave Dielectric Properties of Aqueous Solutions of Potassium Iodide]. *Zhurn. neorgan. khimii*, 2011, vol. 56, no. 4, pp. 697-704.
5. Lyashchenko A.K., Karataeva I.M. Aktivnost vody i dielektricheskaya konstanta vodnykh rastvorov elektrolitov [Water Activity and Dielectric Constant of Aqueous Solutions of Electrolytes]. *Zhurn. fiz. khimii*, 2010, vol. 84, no. 2, pp. 376-384.
6. Lyashchenko A.K., Duniyashev L.V., Duniyashev V.S. Prostranstvennaya struktura vody vo vsey oblasti blizhnego poryadka [Spatial Structure of Water in the Entire Range of Short-Range Order]. *Zhurn. struktur. khimii*, 2006, vol. 47, no. 7, pp. S36–S53.
7. Lyashchenko A.K. Strukturnye i molekulyarno-kineticheskie svoystva kontsentririrovannykh rastvorov i fazovye ravnovesiya vodno-solevykh sistem [Structural and Molecular-Kinetic Properties of Concentrated Solutions and Phase Equilibrium of Water-Salt Systems]. *Kontsentririrovannyye i насыщенные растворы* [Concentrated and Saturated Solutions] Moscow, Nauka Publ., 2002, pp. 93-118.
8. Mikhailov I.G., Solovyov V.A., Syrnikov I.G. *Osnovy molekulyarnoy akustiki* [Fundamentals of Molecular Acoustics]. Moscow, Nauka Publ., 1964. 514 p.
9. Odinaev C., Akdodov D.M., Sharipov N. Issledovanie chastotnoy dispersii dinamicheskikh moduley uprugosti rastvorov elektrolitov na osnove obobshchennogo potentsiala ionno-molekulyarnykh sistem [Study of the Frequency Dispersion of Dynamic Modules of Elasticity of Electrolyte Solutions Based on the Generalized Potential of Ion-Molecular Systems]. *Vestnik Tadzhikskogo natsionalnogo universiteta. Seriya estestvennykh nauk*, 2020, no. 1, pp. 118-130.
10. Odinaev C., Makhmadbegov R.S. Issledovanie chastotnoy dispersii koeffitsienta dielektricheskoy pronitsaemosti rastvorov elektrolitov [Studying the Frequency Dispersion of the Dielectric Permeability of Electrolyte Solutions]. *Zhurn. fiz. khimii* [Rus. J. Phys. Chem. A.], 2016, vol. 90, no. 1, pp. 52-58.
11. Odinaev C., Akdodov D.M., Idibegzoda Kh.I. Issledovanie chastotnoy dispersii koeffitsienta udelnoy elektroprovodnosti vodnykh rastvorov elektrolitov [Investigation of the Region of Frequency Dispersion of the Viscosity Coefficients of Electrolyte Solutions, Taking Into Account the Generalized Interaction Potential]. *Zhurn. struktur. khimii*, 2019, vol. 60, no. 3, pp. 452-460.
12. Odinaev C., Akdodov D.M., Makhmadbegov R.S. Issledovanie chastotnoy dispersii koeffitsientov dielektricheskoy pronitsaemosti i dielektricheskikh poter vodnykh rastvorov iodidov kaliya [Investigation of the Frequency Dispersion of the Dielectric Constants and Dielectric Losses of Aqueous Solutions of Potassium Iodides]. *Zhurn. struktur. khimii*, 2022, vol. 63, no. 6, pp. 826-837.
13. Odinaev C., Makhmadbegov R.S. Issledovanie chastotnoy dispersii koeffitsientov dielektricheskoy pronitsaemosti i dielektricheskikh poter vodnogo rastvora iodida tseziya [Investigation of the Frequency Dispersion of the Coefficients of Permittivity and Dielectric

Losses of an Aqueous Solution of Cesium Iodide]. *Izvestiya Natsionalnoy akademii nauk Tadzhikistana. Otdelenie fiziko-matematicheskikh, khimicheskikh, geologicheskikh i tekhnicheskikh nauk*, 2021, vol. 182, no. 1, pp. 39-49.

14. Odinaev C., Makhmadbegov R.S. Raschet chastotnykh spektrov koeffitsientov dielektricheskoy pronitsaemosti i dielektricheskikh poter vodnykh rastvorov elektrolitov [Calculating Permittivity and Dielectric Loss Frequency Spectra for Aqueous Electrolyte Solutions]. *Zhurn. fiz. khimii* [Rus. J. Phys. Chem. A.], 2018, vol. 92, no. 1, pp. 107-114.

15. Odinaev C., Makhmadbegov R.S. Chastotnaya dispersiya dielektricheskoy pronitsaemosti i dielektricheskikh poter vodnykh rastvorov KCl i CsCl v zavisimosti ot parametrov sostoyaniya [Frequency Dispersion of Dielectric Permittivity and Dielectric Losses in Aqueous KCl and CsCl Solutions Depending on Their State Parameters]. *Ukr. fiz. zhurn.*, 2015, vol. 60, no. 12, pp. 1212-1219.

16. Odinaev C., Makhmadbegov R.S. Chislennyi raschet koeffitsientov dielektricheskoy pronitsaemosti i dielektricheskikh poter vodnogo rastvora KF ot parametrov sostoyaniya [Numerical Calculation of Permittivity and Dielectric Loss of Aqueous KF Solution Depending on State Parameters]. *Zhurn. struktur. khimii*, 2018, vol. 59, no. 3, pp. 621-628.

17. Samoilov O.Ya. *Struktura vodnykh rastvorov elektrolitov i gidratatsiya ionov* [Structure of Aqueous Solutions of Electrolytes and Hydration of Ions]. Moscow, AN SSSR Publ., 1957. 182 p.

18. Smirnova N.A. *Molekulyarnye teorii rastvorov* [Molecular Theories of Solutions]. Leningrad, Khimiya Publ., 1987. 336 p.

19. Lyashchenko A.K., Kobelev A.V., Karataeva I.M., Lileev A.S. Temperaturnye izmeneniya dielektricheskoy pronitsaemosti i relaksatsii vodnykh rastvorov iodida litiya [Dielectric Permittivity and Relaxation of Aqueous Solutions of Cesium Iodide]. *Zhurn. neorgan. khimii*, 2014, vol. 59, no. 7, pp. 971-980.

20. Yukhnovskiy I.R., Golovko M.F. *Statisticheskaya teoriya klassicheskikh ravnovesnykh sistem* [Statistical Theory of Classical Equilibrium Systems]. Kiev, Naukova dumka Publ., 1980. 372 p.

21. Barthel J.M.G., Krienke H., Kunz W. *Physical Chemistry of Electrolyte Solution. Modern Aspects*. Steinkopff; Darmstadt; New York, Springer, 1998. 401 p.

22. Krienke H., Krienke G., Barthel J.M.G. Alkali Metal Halide Solution in 1,4-Dioxide – Water Mixtures. A Monte Carlo Simulation Study. *J. Molecular Liquids*, 2004, vol. 109, pp. 115-124.

23. Lyashchenko A.K., Lileev A.S. Dielectric Relaxation of Water in Hydration Shells of Ions. *J. Chem. Eng. Data*, 2010, vol. 55, pp. 2008-2016.

24. Zasetsky A.Y., Petelina S.V., Lyashchenko A.K., Lileev A.S. Computer Simulation Study of Rotational Diffusion in Polar Liquids of Different Types. *J. Chem. Phys.*, 2010, vol. 133, article ID: 134502.

25. Zasetsky A., Lyashchenko A., Lileev A. Ion–Ion and Ion–Water Aggregations and Dielectric Response of Aqueous Solutions of Li<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>: Molecular Dynamic Simulations Study. *J. Molecular Physics*, 2011, vol. 109, no. 6, pp. 813-822.

**INVESTIGATION OF THE DIELECTRIC PROPERTIES  
OF AQUEOUS SOLUTION OF LITHIUM IODIDE  
TAKING INTO ACCOUNT  
THE GENERALIZED POTENTIAL INTERACTION ENERGY**

**Rashidjon S. Makhmadbegov**

Candidate of Physical and Mathematical Sciences,  
Dean of the Faculty of Natural Sciences,  
Russian-Tajik (Slavonic) University  
Mah86Rashid@mail.ru  
<https://orcid.org/0000-0002-8234-0150>  
Tursunzade St, 30, 734025 Dushanbe, Tajikistan

**Abstract.** On the basis of analytical expressions for the dynamic coefficients of permittivity  $\epsilon_1(\nu)$  and dielectric losses  $\epsilon_2(\nu)$  obtained earlier by the method of kinetic equations for electrolyte solutions, taking into account the contributions of the generalized interaction potential of ionic-molecular systems, the frequency dispersion of these coefficients was studied and numerical calculations were carried out in dependence on temperature  $T$ , density  $\rho$  and concentration  $C$  for lithium iodide solutions. The results of numerical calculations are in satisfactory agreement with the experimental data for aqueous solutions of lithium iodide electrolytes.

**Key words:** permittivity and loss coefficients, friction coefficients, relaxation times, potential interaction energy, radial distribution function.