

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ
НЕОРГАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

УДК 544.014+544.016.2+543.572.3

ФАЗОВЫЙ КОМПЛЕКС ПЯТИКОМПОНЕНТНОЙ ВЗАИМНОЙ
СИСТЕМЫ $\text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+ \parallel \text{F}^-, \text{Cl}^-, \text{Br}^-$ И ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОГО
ПЯТИВЕРШИННИКА $\text{LiF}-\text{KCl}-\text{KBr}-\text{NaBr}-\text{NaCl}$

© 2023 г. А. В. Бурчаков^а, *, И. К. Гаркушин^а, У. А. Емельянова^а

^аСамарский государственный технический университет, ул. Молодогвардейская, 244,
Самара, 443100 Россия

*e-mail: turnik27@yandex.ru

Поступила в редакцию 01.12.2022 г.

После доработки 10.02.2023 г.

Принята к публикации 13.02.2023 г.

Впервые исследован фазовый комплекс пятикомпонентной взаимной системы $\text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+ \parallel \text{F}^-, \text{Cl}^-, \text{Br}^-$. В результате разбиения фазового комплекса системы на стабильные элементы получено древо фаз, имеющее линейное строение и состоящее из стабильных пентатопа $\text{LiF}-\text{NaF}-\text{KF}-\text{KBr}-\text{KCl}$, гексатопа $\text{LiF}-\text{NaBr}-\text{NaCl}-\text{KCl}-\text{KBr}-\text{NaF}$, гептатопа $\text{NaCl}-\text{KCl}-\text{KBr}-\text{LiBr}-\text{LiCl}-\text{LiF}-\text{NaBr}$, соединенных стабильными тетраэдром $\text{LiF}-\text{NaF}-\text{KCl}-\text{KBr}$ и квадратной пирамидой (пятивершинником) $\text{LiF}-\text{KBr}-\text{NaBr}-\text{NaCl}-\text{KCl}$. Методом дифференциального термического анализа изучены фазовые равновесия в стабильном пятивершиннике $\text{LiF}-\text{KCl}-\text{KBr}-\text{NaBr}-\text{NaCl}$. В пятивершиннике реализуется моновариантное фазовое равновесие: $ж \rightleftharpoons \text{LiF} + \text{NaCl}_x\text{Br}_{1-x} + \text{KCl}_y\text{Br}_{1-y}$, где $\text{NaCl}_x\text{Br}_{1-x}$ и $\text{KCl}_y\text{Br}_{1-y}$ – непрерывные ряды твердых растворов на основе NaCl и NaBr , KCl и KBr . Определены состав смеси точки $\text{Min}^{\square} 591$ и минимальная температура моновариантного равновесия. Построена компьютерная 3D-модель в виде проекции фазового комплекса на концентрационный пятивершинник $\text{LiF}-\text{KCl}-\text{KBr}-\text{NaBr}-\text{NaCl}$ в программе КОМПАС 3D. Выделены объемы кристаллизующихся равновесных фаз.

Ключевые слова: фазовые равновесия, непрерывный ряд твердых растворов, физико-химический анализ, пятивершинник, 3D-модель

DOI: 10.31857/S0044457X22602085, EDN: RHNCXD

ВВЕДЕНИЕ

Анализ многокомпонентных систем и дизайн фазовых диаграмм, а также определение характера связи между веществами помогают установить различные свойства компонентов и смесей на их основе. Особое внимание уделяется солевым расплавам и твердым растворам.

Исследование данных систем позволяет обнаружить низкоплавкие невариантные смеси, которые отличаются высокой электропроводностью, термостойкостью, низкой летучестью и малым коэффициентом объемного расширения при фазовом переходе. Эти параметры обязательны для получения расплавляемых электролитов для химических источников тока с рабочей температурой в диапазоне 300–600°C. Солевые смеси находят также применение и в других сферах, например, флюсы для сварки и пайки, теплоаккумулирующие материалы, среды для выращивания монокристаллов и органического синтеза [1–15].

Согласно [16], система $\text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+ \parallel \text{F}^-, \text{Cl}^-, \text{Br}^-$ относится к классу 3K|3A (три катиона и три ани-

она) и является пятикомпонентной взаимной системой, поскольку число компонентов в системе определяется как сумма числа катионов и анионов минус один ($3 + 3 - 1 = 5$). Одним из элементов древа фаз пятикомпонентной взаимной системы $\text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+ \parallel \text{F}^-, \text{Cl}^-, \text{Br}^-$ является стабильный пятивершинник $\text{LiF}-\text{KCl}-\text{KBr}-\text{NaBr}-\text{NaCl}$ (рис. 1) [17].

Цель настоящей работы – изучение фазового комплекса указанного стабильного пятивершинника и в случае образования минимума моновариантного равновесия определение состава и температуры равновесия смеси для данной точки.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Объектом исследования являлся комплекс, состоящий из пятикомпонентной взаимной системы $\text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+ \parallel \text{F}^-, \text{Cl}^-, \text{Br}^-$ и входящего в нее, исходя из анализа древа фаз [17], стабильного элемента – пятивершинника $\text{LiF}-\text{KCl}-\text{KBr}-\text{NaBr}-\text{NaCl}$.

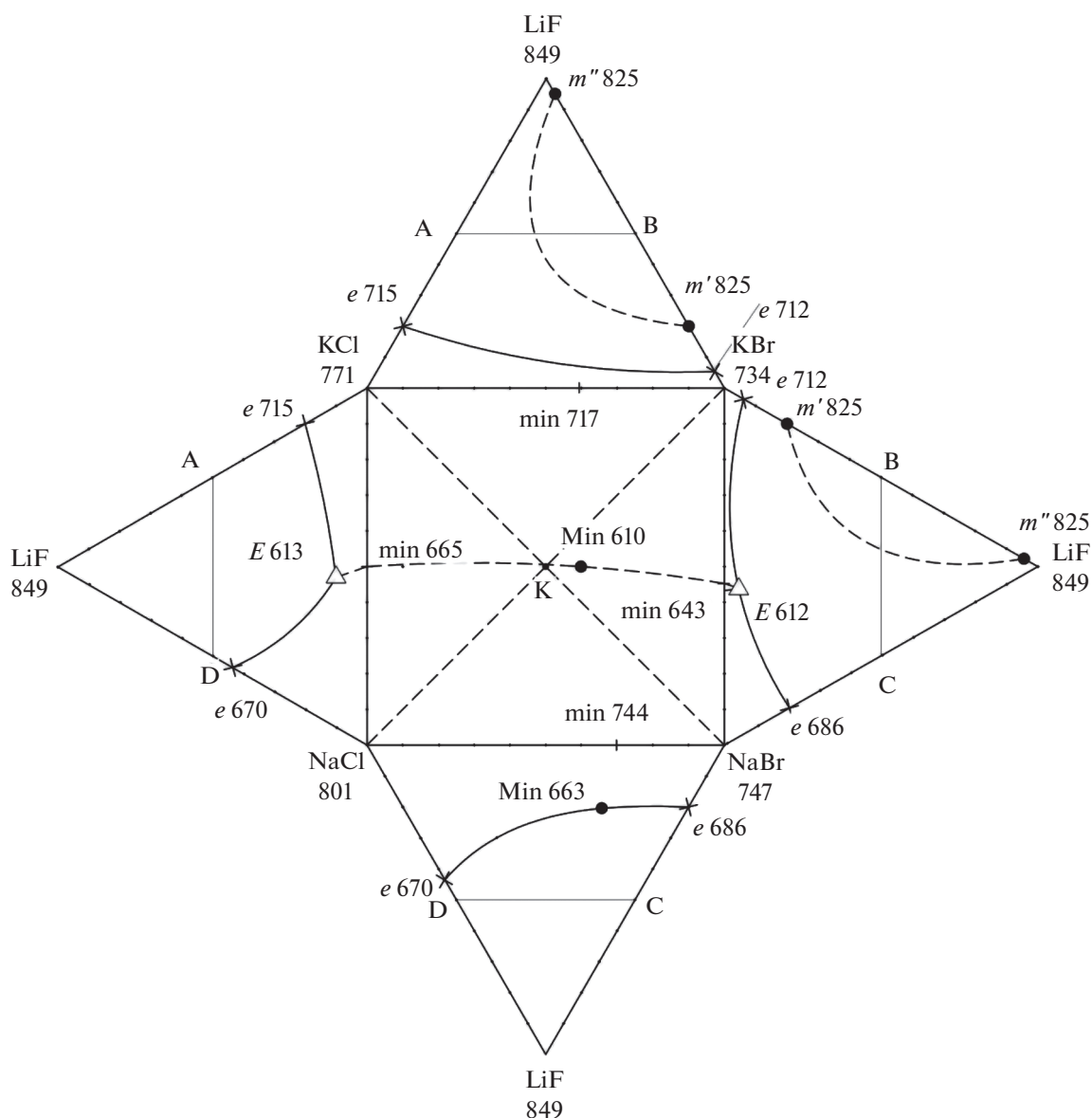


Рис. 1. Развертка граневых элементов пятивершинника LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl.

Развертка стабильного пятивершинника LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl представлена на рис. 1.

В трехкомпонентных ограничивающих системах LiF–NaCl–KCl и LiF–KBr–NaBr реализуются эвтектические равновесия: для точки *E* 613 $\rightleftharpoons \text{LiF} + \text{NaCl}_{\text{ss}} + \text{KCl}_{\text{ss}}$, для точки *E* 612 $\rightleftharpoons \text{LiF} + \text{NaBr}_{\text{ss}} + \text{KBr}_{\text{ss}}$, где NaCl_{ss} – ограниченный (граничный) твердый раствор на основе компонента NaCl, а в системах LiF–KCl–KBr и LiF–NaCl–NaBr осуществляется моновариантное фазовое равновесие согласно фазовым реакциям: моновариантная линия *e* 670–*e* 686 – $\rightleftharpoons \text{LiF} + \text{NaCl}_x\text{Br}_{1-x}$; моновариантная линия *e* 715–*e* 712 – $\rightleftharpoons \text{LiF} + \text{KCl}_x\text{Br}_{1-x}$, где $\text{NaCl}_x\text{Br}_{1-x}$ и $\text{KCl}_x\text{Br}_{1-x}$ – непрерывные ряды твердых растворов (НТР) на осно-

ве пар солей KCl и KBr, NaCl и NaBr. Результаты данных исследований представлены в работах [18–25].

В ограничивающей трехкомпонентной взаимной системе $\text{Na}^+, \text{K}^+ \parallel \text{Cl}^-, \text{Br}^-$ образуются бинарные твердые растворы $\text{NaCl}_x\text{Br}_{1-x}$ и $\text{KCl}_y\text{Br}_{1-y}$. Как указано в работе [26], фазовые равновесия в тройной взаимной системе $\text{Na}^+, \text{K}^+ \parallel \text{Cl}^-, \text{Br}^-$ с непрерывными твердыми растворами соответствуют виду 25а (четыре двойных минимума и один тройной). На поверхности ликвидуса системы имеется точка минимума Min 610 (NaBr – 50%, KCl – 39%, KBr – 11% при температуре 610°C). В квазибинарной системе LiF–KBr наблюдается ограниченная растворимость компонентов в жидкой фазе, поэто-

му в трехкомпонентных ограничивающих системах LiF–KCl–KBr и LiF–KBr–NaBr отмечены области расслаивания жидкости (на рисунке показаны пунктирными линиями), которые описываются моновариантными монотектическими равновесиями: $ж_1 \rightleftharpoons ж_2 + LiF$. Учитывая вышесказанное, в стабильном пятивершиннике прогнозируется моновариантное фазовое равновесие $ж \rightleftharpoons LiF + NaCl_xBr_{1-x} + KCl_yBr_{1-y}$, где $NaCl_xBr_{1-x}$ и KCl_yBr_{1-y} – непрерывные ряды твердых растворов на основе NaCl и NaBr, KCl и KBr, и область концентрации, примыкающая к стороне LiF–KBr и характеризующаяся расслоением жидкости и монотектическим равновесием $ж_1 \rightleftharpoons ж_2 + LiF$.

Экспериментальные исследования фазовых равновесных состояний типа жидкость–твердое тело проводили методом дифференциального термического анализа [27–31]. В качестве реактивов использовали LiF марки “ч. д. а.” (ТУ 6-09-170-77), KBr “ч. д. а.” (ГОСТ 4160-74), KCl “ч. д. а.” (ГОСТ 4234-77), NaCl “ч. д. а.” (ГОСТ 4233-77), NaBr “ч. д. а.” (ГОСТ 4169-76). Все составы выражены в мол. %, температуры – в °С. Диапазон изучаемых температур 400–900°С.

В качестве геометрического метода моделирования было выбрано 3D-моделирование. В работах [32, 33] авторами предлагается методика построения фазового комплекса трехкомпонентной системы в виде 3D-модели. Технология основана на координатном методе построения точек, полученных экспериментально. В качестве расчетной программы служит MO Excel, в качестве графической программы – редактор трехмерной векторной графики, программа автоматизированного проектирования КОМПАС-3D [34, 35].

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Метод расчета координат точек пятивершинника по координатам состава. Для построения 3D-модели фазового комплекса стабильного пятивершинника LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl пятикомпонентной взаимной системы $Li^+, Na^+, K^+ || F^-, Cl^-, Br^-$ и модели по координатам фигуративных точек (двойные, тройные, четверные эвтектики и перитектики и т.д.) необходимо выполнить пересчет координат этих точек (табл. 1). Подобный пересчет координат представлен в работах [36–38]. Поскольку в данном случае пространственная фазовая диаграмма представляет собой концентрационный пятивершинник, для пересчета координат из барицентрических (состав фигуративной точки) в декартовы координаты (x, y, z) используем следующие уравнения:

$$(x_i, y_i, z_i) = (a_i, b_i, c_i, d_i, e_i) \times \begin{pmatrix} x_a & y_a & z_a \\ x_b & y_b & z_b \\ x_c & y_c & z_c \\ x_d & y_d & z_d \\ x_e & y_e & z_e \end{pmatrix} = (a_i, b_i, c_i, d_i, e_i) \times \begin{pmatrix} -50 & -50 & 0 \\ 50 & -50 & 0 \\ 50 & 50 & 0 \\ -50 & 50 & 0 \\ 0 & 0 & 70.71 \end{pmatrix} \quad (1)$$

где (x_i, y_i, z_i) – матрица-строка декартовых координат фигуративной точки i ; $(a_i, b_i, c_i, d_i, e_i)$ – матрица-строка координат фигуративной точки i в барицентрической системе относительно вершин пятивершинника. Она соответствует эквивалентным долям

$$\begin{pmatrix} -50 & -50 & 0 \\ 50 & -50 & 0 \\ 50 & 50 & 0 \\ -50 & 50 & 0 \\ 0 & 0 & 70.71 \end{pmatrix} -$$

матрица декартовых координат для вершин точечных базисов. Предположим, что пятивершинник (квадратная пирамида) представляет собой фигуру с длиной ребер, равной 100 единицам, и в основании которой лежит квадрат. Кроме того, начало декартовой системы координат расположено в центре квадрата (рис. 2).

Исследование стабильного пятивершинника LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl методом ДТА. Развертка граневых элементов пятивершинника представлена на рис. 1. На основании анализа развертки граневых элементов для исследования было выбрано политермическое сечение А [LiF – 50%; KCl – 50%]–В [LiF – 50%; KBr – 50%]–С [LiF – 50%; NaBr – 50%]–D [LiF – 50%; NaCl – 50%] в объеме кристаллизации фторида лития (рис. 3). В сечении А–В–С–D экспериментально исследован политермический разрез А [LiF – 50%; KCl – 50%]–С [LiF – 50%; NaBr – 50%], представленный на рис. 4.

Из разреза А–С (рис. 4) выявлена точка x 591 пересечения данного разреза с проекцией $\bar{E} 613 - \bar{E} 612$ моновариантной линии $E 613 - E 612$, где $\bar{E} 613$ и $\bar{E} 612$ – проекции тройных эвтектик $E 613$ и $E 612$ на отрезки AD и BC соответственно.

Таблица 1. Базовые геометрические элементы модели для системы LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl

Фазовая область	Число равновесных фаз, Φ	Степень свободы, C	Геометрические элементы модели
$ж + LiF + NaCl_xBr_{1-x} + KCl_xBr_{1-x}$	4	1	Линия $E 612 - Min^{\square} 591 - E 613$
$ж + LiF + KCl_xBr_{1-x}$	3	2	Поверхность $E 613 - e 715 - e 712 - E 612 - Min^{\square} 591 - E 613$
$ж + LiF + NaCl_xBr_{1-x}$	3	2	Поверхность $E 613 - e 670 - e 686 - E 612 - Min^{\square} 591 - E 613$
$ж + NaCl_xBr_{1-x} + KCl_xBr_{1-x}$	3	2	Поверхность $E 613 - min 665 - min 643 - E 612 - Min^{\square} 591 - E 613$
$ж_1 + ж_2 + LiF$	3	2	Поверхность $m' 825 - m'' 825$
$ж_1 + ж_2$	2	3	Локальный объем (синий)
$ж + NaCl_xBr_{1-x}$	2	3	Локальный объем (зеленый)
$ж + LiF$	2	3	Локальный объем (розовый)
$ж + KCl_xBr_{1-x}$	2	3	Локальный объем (желтый)

Для определения состава четверного минимума $Min^{\square} 591$ были выбраны дополнительные точки I и II на предполагаемой проекции моновариантной линии $\bar{E} 613 - \bar{E} 612$ (рис. 3). В этих точках температура конечной кристаллизации выше, чем в точке $x 591$. Отсюда следует, что точка $x 591$ является проекцией $Min^{\square} 591$ для точки четверного минимума $Min^{\square} 591$.

Для выявления состава четверного минимума $Min^{\square} 591$ изучен политермический разрез LiF–N [KCl – 48%; NaBr – 52%], проходящий через точку $Min^{\square} 591$ ($x 591$). На рис. 5 представлена $T-x$ -диаграмма данного разреза. Из разреза определены состав и температура четверного минимума $Min^{\square} 591$: LiF – 6%, KCl – 45.1%, NaBr – 48.88%, $t_{пл} = 591^{\circ}C$.

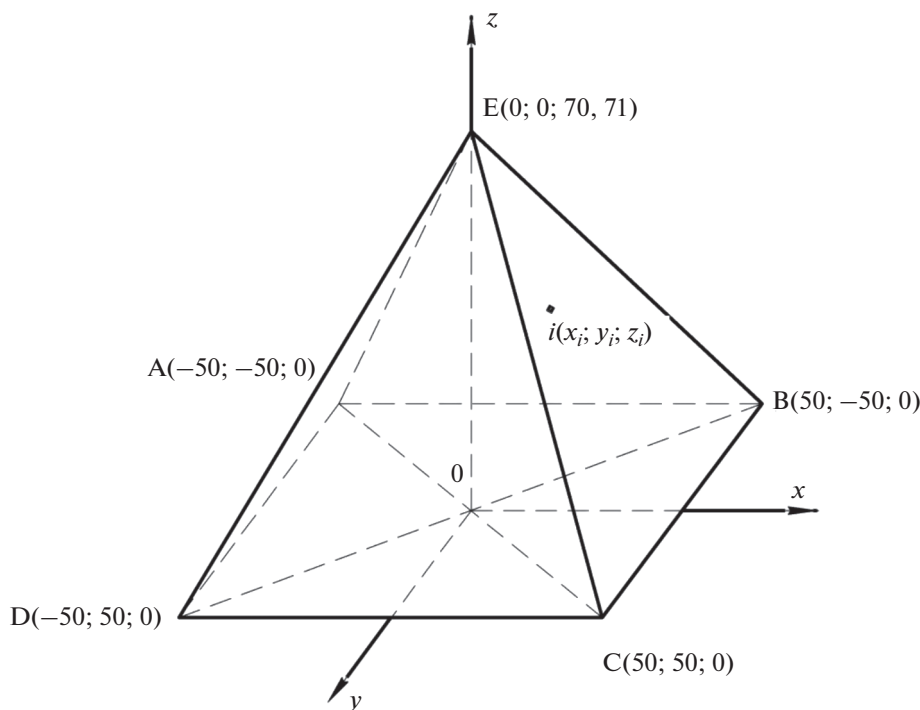


Рис. 2. Схема пятивершинника ABCDE и внедренная декартова система координат $0xuz$. Фигуративная точка i .

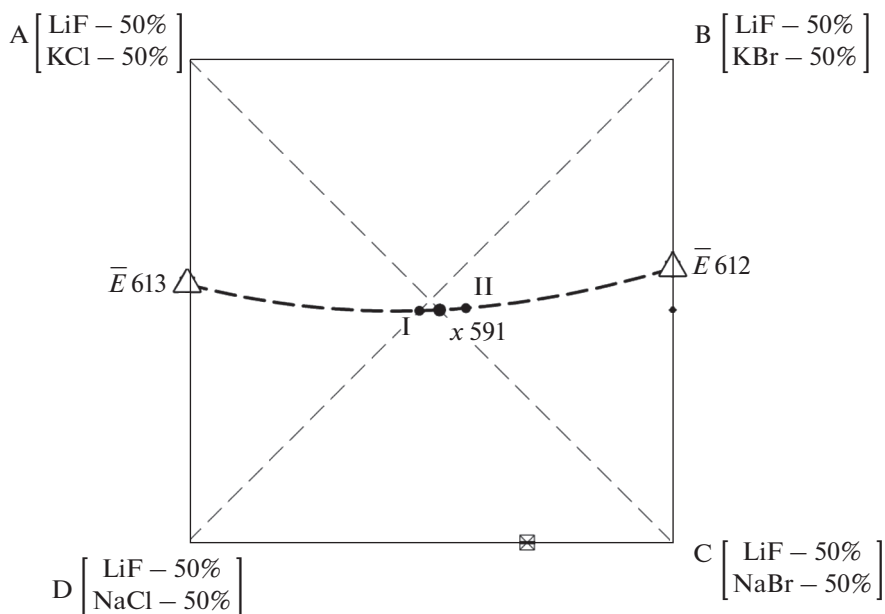


Рис. 3. Концентрационный квадрат политермического сечения А–В–С–D пятивершинника LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl.

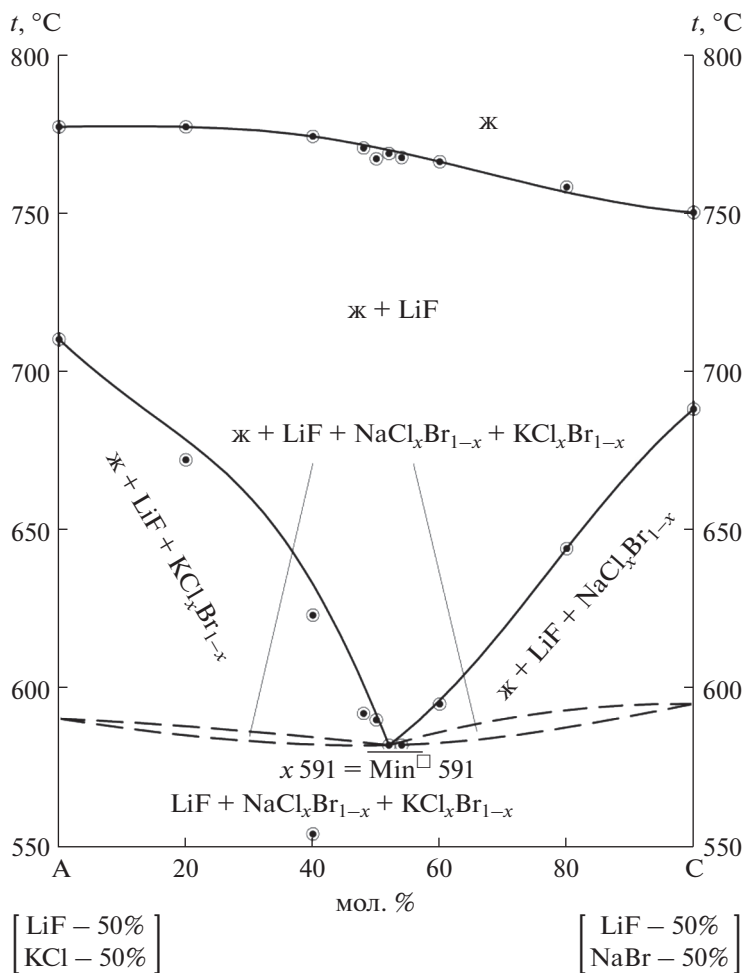


Рис. 4. T–x-диаграмма разреза А–С пятивершинника LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl.

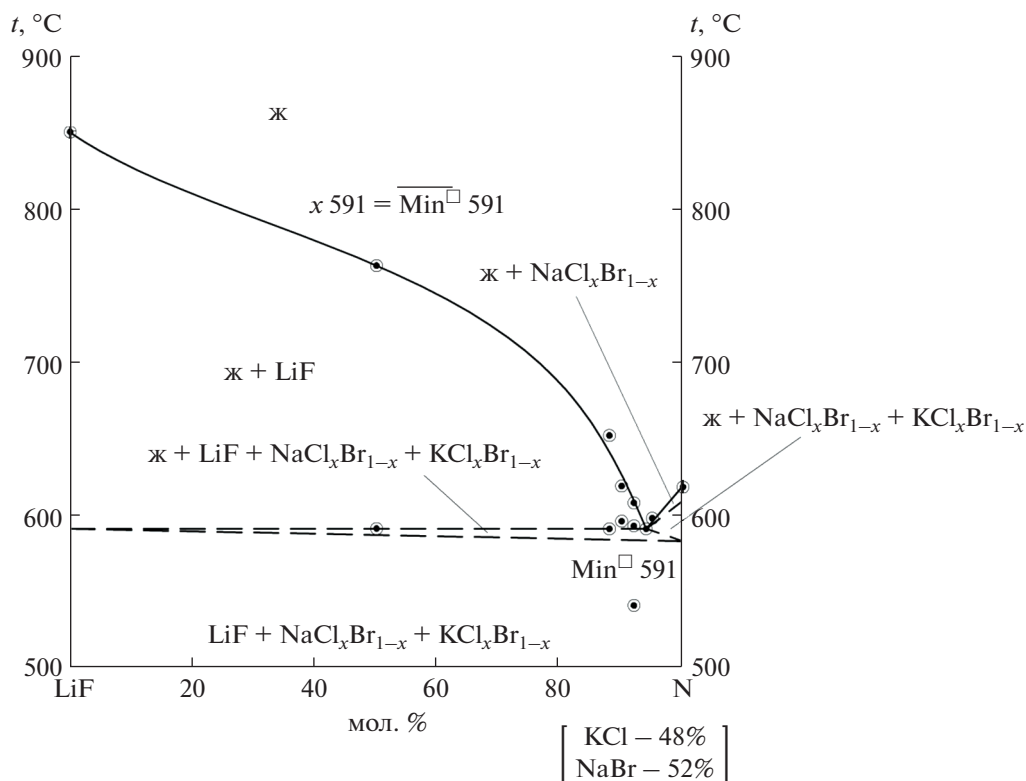


Рис. 5. T - x -диаграмма разреза LiF–N в пятивершиннике LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На T - x -диаграмме разреза А–С (рис. 4) имеется солидусная область с трехфазным равновесием, две из этих фаз представляют НРТР. Дополнительные исследования в секущем квадрате А–В–С–D указывают на наличие четверного минимума на линии моновариантного фазового равновесия $ж \rightleftharpoons LiF + NaCl_xBr_{1-x} + KCl_yBr_{1-y}$, соединяющей тройные эвтектики $E 612$ и $E 613$ в стабильных треугольниках NaF–LiF–KBr и LiF–NaF–KCl соответственно.

На основании экспериментальных результатов и данных элементов ограничения построена 3D-модель в виде проекции гиперповерхности ликвидуса фазового комплекса на концентрационный пятивершинник LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl (рис. 6).

Объемы кристаллизации фаз изображены различными цветами для большей наглядности: розовым – фаза LiF, желтым – непрерывные ряды твердых растворов KCl_xBr_{1-x} , зеленым – НРТР $NaCl_xBr_{1-x}$, синим – область расслоения жидких фаз $ж_1 + ж_2$.

Проведем расчет мольного баланса для уравнения реакции моновариантного фазового равновесия, реализуемого в точке четверного мини-

мума $Min^{\square} 591$. Для этого составим уравнение фазовой реакции в общем виде:

$$ж (6LiF + 45.12KCl + 48.88NaBr) = aLiF + bNaCl_xBr_{1-x} + cKCl_yBr_{1-y} \quad (2)$$

Составим мольный баланс по ионам для данного уравнения фазовой реакции (3) и решим систему уравнений:

$$\begin{cases} Li^+ : 6 = a \\ Na^+ : 48.88 = b \\ K^+ : 45.12 = c \\ F^- : 6 = a \\ Cl^- : 45.12 = bx + cy \\ Br^- : 48.88 = b(1-x) + c(1-y) \\ x = y. \end{cases} \quad (3)$$

Решение системы уравнений отобразим в уравнении (4):

$$ж (6LiF + 45.12KCl + 48.88NaBr) = 6LiF + 48.88NaCl_{0.48}Br_{0.52} + 45.12KCl_{0.48}Br_{0.52} \quad (4)$$

Решение вышеизложенной задачи, а именно определение фазовой реакции (состава и количества равновесных фаз) для состава точки миниму-

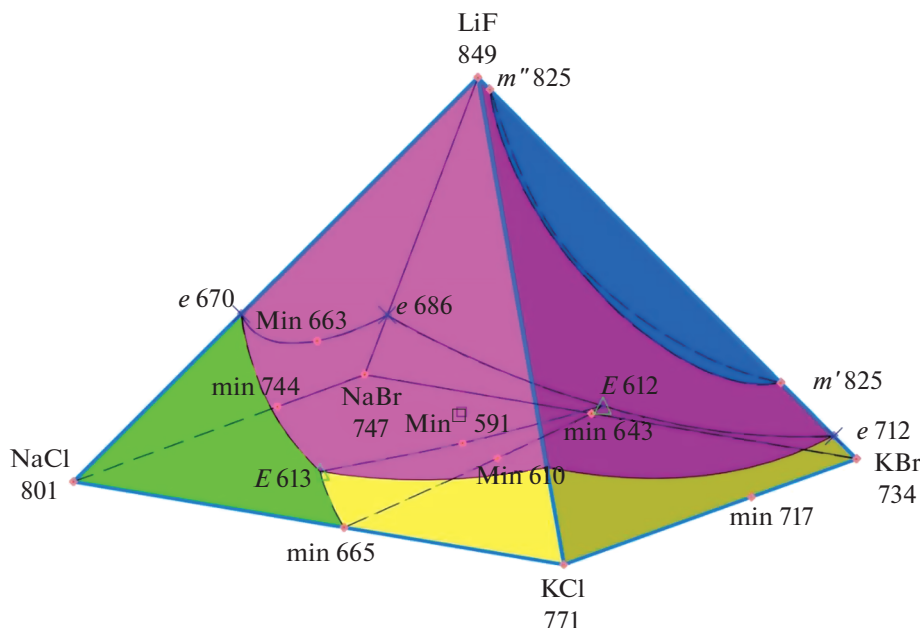


Рис. 6. Компьютерная 3D-модель фазового комплекса стабильного пятивершинника LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl.

ма моновариантного равновесия, можно осуществить с помощью геометрических измерений в 3D-модели (рис. 7). Для решения данной задачи вначале проведем прямую LiF–М из вершины LiF через точку минимума Min[□] 591 до пересечения с плоскостью KBr–NaBr–NaCl–KCl в точке М. Затем через точку М построим прямую ОР, параллельную стороне NaBr–KBr, до пересечения данной прямой со сторонами KCl–KBr и NaCl–NaBr соответственно в точках О и Р. Таким образом, получим треугольник LiF–О–Р. В плоскости треугольника LiF–О–Р построим прямые N–Min[□] 591 и О'–Min[□] 591, проходящие через точку Min[□] 591 и параллельные сторонам LiF–Р и ОР соответственно.

Точки О и Р описывают состав равновесных сосуществующих фаз НРТР KCl_xBr_{1-x} и NaCl_xBr_{1-x} по выражению: $x = \frac{l(O - KBr)}{l(KCl - KBr)}$, где l – длина указанного отрезка. Полагаем, что содержание хлорид- и бромид-ионов в этих фазах имеет одинаковые значения. Для этого используем следующие уравнения:

$$\text{фаза LiF} : X(\text{LiF}) = \frac{l(O - O')}{l(O - \text{LiF})} \times 100\%, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \text{фаза KCl}_x\text{Br}_{1-x} : X(\text{KCl}_x\text{Br}_{1-x}) = \\ = \frac{l(\text{LiF} - N)}{l(O - \text{LiF})} \times 100\%, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \text{фаза NaCl}_x\text{Br}_{1-x} : X(\text{NaCl}_x\text{Br}_{1-x}) = \\ = \frac{l(O' - N)}{l(O - \text{LiF})} \times 100\%, \end{aligned} \quad (7)$$

где X – это мольная доля фазы, выраженная в мол. %.

Соотношение равновесных кристаллизующихся фаз для фазовой реакции точки минимума можно описать положением точек О' и N на отрезке О–LiF.

Состав равновесной жидкой фазы для данного фазового равновесия соответствует составу точки минимума.

Таким образом, по приведенным выше уравнениям проведен расчет равновесных фаз, который дал следующие значения:

$$\text{фаза LiF} : X(\text{LiF}) = 5.9\%, \quad (8)$$

$$\text{фаза KCl}_x\text{Br}_{1-x} : X(\text{KCl}_x\text{Br}_{1-x}) = 45.1\%, \quad (9)$$

$$\text{фаза NaCl}_x\text{Br}_{1-x} : X(\text{NaCl}_x\text{Br}_{1-x}) = 48.8\%. \quad (10)$$

Расчет по системе уравнений сходится и свидетельствует о приемлемости использования 3D-модели для расчета равновесных фаз для заданной фигуративной точки при заданной температуре.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследован секущий элемент дерева фаз пятикомпонентной взаимной системы Li⁺, Na⁺, K⁺||F⁻, Cl⁻, Br⁻ – стабильный пятивершинник LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl. Экспериментально изучены фа-

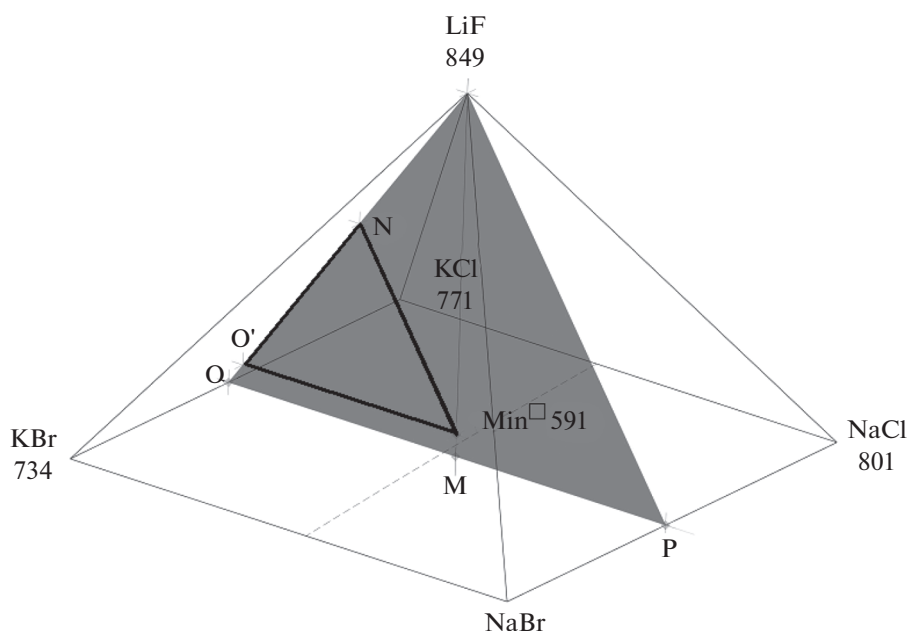


Рис. 7. Компьютерная 3D-модель системы LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl, используемая для определения равновесных фаз при температуре точки минимума Min[□] 591.

зовые равновесия в стабильном пятивершиннике LiF–KCl–KBr–NaBr–NaCl методом ДТА, определены состав и температура плавления смеси, отвечающей точке минимума Min[□] 591. Выполнено построение модели фазового комплекса системы и определены объемы кристаллизации фаз.

Приведен алгоритм расчета декартовых координат фигуративных точек пятивершинника составов по барицентрическим координатам (содержанию компонентов в смеси для точки). Реализован алгоритм расчета составов равновесных сосуществующих фаз для точки минимума: по геометрическому и алгебраическому методам (система линейных уравнений). Оба метода показали схожие результаты. Данный алгоритм эффективно применять для прогноза равновесных фаз (состав фаз и их соотношение) в фигуративных точках четырехкомпонентных систем, отвечающих определенным типам фазовых равновесий (эвтектические, перитектические, монотектические равновесия, минимумы кристаллизации НРТР и т.д.)

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках проектной части государственного задания № 0778-2020-0005.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Babanly M.B., Chulkov E.V., Aliev Z.S. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2017. V. 62. № 13. P. 1703. <https://doi.org/10.1134/S0036023617130034>
2. Imatliyeva S.Z., Babanly D.M., Tagiev D.B. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2018. V. 63. № 13. P. 1704. <https://doi.org/10.1134/S0036023618130041>
3. Вердиева З.Н., Вердиев Н.Н., Мусаева П.А., Сириева Я.Н. // Химическая термодинамика и кинетика. Сб. матер. XI Междунар. научн. конф. Великий Новгород: Изд-во Новгород. гос. ун-та им. Ярослава Мудрого, 2021. С. 51.
4. Коровин Н.В., Скундин А.М. Химические источники тока. М.: Изд-во МЭИ, 2003. 740 с.
5. Fedorov P.P., Popov A.A., Shubin Y.V. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2022. V. 67. № 12. P. 2018. <https://doi.org/10.1134/S0036023622601453>
6. Elokhov A.M., Kudryashova O.S. // Russ. J. Inorg. Chem. 2022. V. 67. № 11. P. 1818. <https://doi.org/10.1134/S0036023622600903>
7. Wang K., Dowling A.W. // Curr. Opin. Chem. Eng. 2022. V. 36. P. 100728. <https://doi.org/10.1016/j.coche.2021.100728>
8. Liu W.-J., Jiang H., Yu H.-Q. // Chem. Rev. 2015. V. 115. № 22. P. 12251. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.5b00195>
9. Yuan K., Shi J., Aftab W. et al. // Adv. Funct. Mater. 2020. P. 1904228. <https://doi.org/10.1002/adfm.201904228>
10. Atinafu D.G., Yun B.Y., Yang S. et al. // J. Hazard. Mater. 2022. V. 423. P. 127147. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2021.127147>
11. Бабаев Б.Д. // Теплофизика высоких температур. 2014. Т. 52. № 4. С. 568.

12. *Шашков М.О., Гаркушин И.К.* // Журн. неорган. химии. 2019. Т. 64. № 2. С. 206.
13. *Fu T., Zheng Z., Du Y. et al.* // Comput. Mater. Sci. 2019. V. 159. P. 478.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.036>
14. *Lantelme F., Groult H.* Molten Salts Chemistry: From Lab to Applications. Elsevier, 2013.
15. *Chang Y.A., Chen S., Zhang F. et al.* // Prog. Mater Sci. 2004. V. 49. № 3–4. P. 313.
16. *Радищев В.П.* Многокомпонентные системы. М.: ИОНХАН СССР, 1964. 502 с.
17. *Гаркушин И.К., Бурчаков А.В., Емельянова У.А. и др.* // Журн. неорган. химии. 2020. Т. 65. № 7. С. 950.
18. Термические константы веществ. Справочник в 10 вып. / Под ред. Глушко В.П. М.: ВИНТИ, 1981. Вып. 10. Ч. 1. С. 42.
19. Термические константы веществ. База данных. <http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl?show=wel-com.html>
20. *Егорцев Г.Е.* // Автореф. дис. ... канд. хим. наук. Самара, 2007. 24 с.
21. *Егорцев Г.Е., Истомова М.А.* // Материалы XIV Междунар. конф. студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам “Ломоносов–2007”. М., 2007. С. 460.
22. *Воскресенская Н.К., Евсеева Н.Н., Беруль С.И. и др.* Справочник по плавкости систем из безводных неорганических солей. М.: Изд-во АН СССР, 1961. Т. 1. 845 с. Т. 2. 585 с.
23. Диаграммы плавкости солевых систем. Многокомпонентные системы / Под ред. Посыпайко В.И., Алексеевой Е.А. М.: Химия, 1977. 216 с.
24. *Егорцев Г.Е., Гаркушин И.К., Истомова М.А.* Фазовые равновесия и химическое взаимодействие в системах с участием фторидов и бромидов щелочных металлов. Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 2008. 132 с.
25. ACerS-NIST. Phase Equilibria Diagrams. CD-ROM Database. Version 3.1.0. American Ceramic Society. National Institute of Standards and Technology. Order online: www.ceramics.org.
26. *Федоров П.П., Бучинская И.И., Серафимов Л.А.* // Журн. неорган. химии. 2002. Т. 47. № 8. С. 1371.
27. *Уэндландт У.* Термические методы анализа. М.: Мир, 1978. 527 с.
28. *Берг Л.Г.* Введение в термографию. М.: Наука, 1969. 395 с.
29. *Бурмистрова Н.П., Прибылов К.П., Савельев В.П.* Комплексный термический анализ. Казань: КГУ, 1981. 110 с.
30. *Моценский Ю.В., Трунин А.С.* Приборы для термического анализа и калориметрии. Куйбышев, 1989. 3 с.
31. *Моценский Ю.В.* // Приборы и техника эксперимента. 2003. № 6. С. 143.
32. *Гаркушин И.К., Дворянова Е.М., Бурчаков А.В.* Моделирование фазовых систем и фазовых равновесий. Самара: Самар. гос. техн. ун-т, 2015. Ч. 1. 176 с.
33. *Бурчаков А.В., Дворянова Е.М., Кондратюк И.М.* // III Междунар. науч. Интернет-конф. М., 2015. Т. 1. С. 56.
34. *Ганин Н.Б.* Проектирование и прочностной расчет в системе КОМПАС-3D V13. М.: ДМК Пресс, 2011. 320 с.
35. <https://kompas.ru/>
36. *Луцык В.И., Зеленая А.Э.* // Журн. неорган. химии. 2004. Т. 49. № 2. С. 316.
37. *Lutsyk V., Vorob'eva V.Z.* // Naturforsch., A: Phys. Sci. 2008. V. 63. № 7–8. P. 513.
<https://doi.org/10.1515/zna-2008-7-819>
38. *Бурчаков А.В.* // Материалы XI Всерос. научн. конф. “Матем. моделирование и краевые задачи”. Самара: СамГТУ, 2019. Т. 2. С. 127.