

ISSN 1561-8331 (Print)
ISSN 2524-2342 (Online)
УДК 544.344.015.3
<https://doi.org/10.29235/1561-8331-2024-60-2-105-114>

Поступила в редакцию 17.03.2023
Received 17.03.2023

М. Д. Парфенова, В. П. Воробьева, В. И. Луцык, А. Э. Зеленая, В. Д. Балданов

*Институт физического материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук, Улан-Удэ, Россия*

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА СИСТЕМЫ LiCl-PrCl₃-KCl ЭВТЕКТИЧЕСКОГО ТИПА С ВЫКЛИНИВАЮЩИМСЯ ЛИКВИДУСОМ БИНАРНОГО СОЕДИНЕНИЯ

Аннотация. По опубликованным экспериментальным данным (фазовым диаграммам трех бинарных систем, четырьмя изотермическими разрезами и термограммам 33 сплавов) построена пространственная (трехмерная – 3D) компьютерная модель фазовой диаграммы LiCl-PrCl₃-KCl. Показано, что в общем случае ее формируют 66 поверхностей и 27 фазовых областей, однако вследствие пренебрежимо малой растворимости исходных хлоридов и стехиометричности двух бинарных соединений в реальности она состоит из 31 поверхности и 14 фазовых областей. Оценкой качества полученной 3D-модели служит сравнение модельных и исходных изотермических разрезов и расчет функций отклика для 33 сплавов со значениями температур на границах областей первичной кристаллизации, приведенными на термограммах. Геометрическое строение фазовой диаграммы LiCl-PrCl₃-KCl рассматривается также как иллюстрация особенностей тройных систем эвтектического типа в зависимости от природы образующихся в них двойных соединений.

Ключевые слова: фазовые диаграммы, компьютерное моделирование, хлориды лития, празеодима, калия

Для цитирования. Фазовая диаграмма системы LiCl-PrCl₃-KCl эвтектического типа с выклинивающимся ликвидусом бинарного соединения / М. Д. Парфенова [и др.] // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. хім. навук. – 2024. – Т. 60, № 2. – С. 105–114. <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2024-60-2-105-114>

M. D. Parfenova, V. P. Vorob'eva, V. I. Lutsyk, A. E. Zelenaya, V. D. Baldanov

*Institute of Physical Materials Science
Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Ulan-Ude, Russia*

PHASE DIAGRAM OF THE EUTECTIC TYPE LiCl-PrCl₃-KCl SYSTEM WITH WEDGING LIQUIDUS OF BINARY COMPOUND

Abstract. Based on the published experimental data (phase diagrams of three binary systems, four isothermal sections and DTA curves of 33 alloys), a spatial (three-dimensional – 3D) computer model of the LiCl-PrCl₃-KCl phase diagram has been constructed. It is shown that, in the general case, the diagram is formed by 66 surfaces and 27 phase regions; however, due to the negligible solubility of the initial chlorides and the stoichiometry of the two binary compounds in reality, it consists of 31 surfaces and 14 phase regions. The evaluation of the quality of the obtained 3D model is a comparison of model and initial isothermal sections and calculation of response functions for 33 alloys with temperature values at the boundaries of the primary crystallization regions shown on DTA traces. The geometric structure of the LiCl-PrCl₃-KCl phase diagram is also considered as an illustration of the features of ternary systems of the eutectic type, depending on the nature of the formed in them binary compounds.

Key words: phase diagrams, computer simulation, lithium, praseodymium, potassium chlorides

For citation. Parfenova M. D., Vorob'eva V. P., Lutsyk V. I., Zelenaya A. E., Baldanov V. D. Phase diagram of the eutectic type LiCl-PrCl₃-KCl system with wedging liquidus of binary compound. *Vestsi Natsyyanal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya khimichnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Chemical series*, 2024, vol. 60, no. 2, pp. 105–114 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2024-60-2-105-114>

Введение. Система LiCl-PrCl₃-KCl представляет собой как практический, так и теоретический интерес. При изучении системы прежде всего необходимо понимать, как взаимодействует хлорид празеодима в среде хлоридов лития и калия при очистке отработанного ядерного топлива.

Ряд публикаций, посвященных истории изучения системы LiCl-KCl и цитируемых в [1], дает экспериментально проверенные данные по ее диаграмме состояния. Эта система с простой эвтектикой известна как электролит. Однако не менее важное значение имеют результаты исследований о применении расплавов, основанных на смеси ее эвтектики с хлоридами лантаноидов, для

рафинирования переработанного топлива ядерных реакторов [2, 3], в частности смесей эвтектики LiCl-KCl с хлоридом празеодима.

Система LiCl-PrCl₃, как и LiCl-KCl, – тоже простая эвтектическая [4]. А вот система PrCl₃-KCl – более сложная, с образованием двух соединений, одно из которых конгруэнтного типа плавления разлагается при 762 К на KCl и второе соединение инконгруэнтного типа плавления, образующееся при 890 К по перитектической реакции [5, 6]. Отсюда понятно, что и теоретически фазовая диаграмма системы LiCl-PrCl₃-KCl интересна тем, что в ее формировании участвует бинарная система с образованием двух соединений, что позволяет рассматривать ее как представителя семейства фазовых диаграмм эвтектического типа с соединениями, в том числе инконгруэнтного или конгруэнтного плавления, с экзотермическими либо эндотермическими промежуточными фазами [7, с. 93], включая фазовые диаграммы тройных систем с выклинивающимся ликвидусом.

Цели и задачи. Цель настоящей работы состоит в том, чтобы тщательно проанализировать геометрическое строение фазовой диаграммы LiCl-PrCl₃-KCl с учетом особенностей образующихся в системе соединений и на основе этого анализа построить ее трехмерную (3D) компьютерную модель.

Большую работу по экспериментальному изучению данной тройной системы провел С. Гош [8, 9]. Согласно литературным источникам [1–6, 8, 9] тройную систему образуют две бинарные системы с простой эвтектикой, примыкающие к хлориду лития. В третьей двойной системе PrCl₃-KCl формируются два соединения: конгруэнтно K₃PrCl₆ и инконгруэнтно K₂PrCl₅ плавящиеся [5, 6, 8, 9]. С их участием выполняются четыре трехфазные реакции (рис. 1, а): перитектическая p_{R1R2}: L+K₃PrCl₆→K₂PrCl₅ образования соединения K₂PrCl₅, две эвтектические e_{BR2}: L→PrCl₃+K₂PrCl₅ и e_{CR1}: L→KCl+K₃PrCl₆, а также реакция e^{R1}_{CR2}: K₃PrCl₆→KCl+K₂PrCl₅ разложения K₃PrCl₆ на KCl и K₂PrCl₅ (эвтектоидного типа). Поскольку интерпретация этих фазовых реакций затрудняется вырожденностью линий солидуса и сольвуса, то для лучшего понимания фазовой диаграммы построен ее прототип (рис. 1, б), в котором однофазные области искусственно расширены. Соединение K₃PrCl₆ разбивает фазовую диаграмму на две подсистемы PrCl₃-K₃PrCl₆ и K₃PrCl₆-KCl (рис. 1, а). При 762 К оно разлагается на K₂PrCl₅ и KCl, так что ниже 762 К бинарная система разбивается на другие две подсистемы: PrCl₃-K₂PrCl₅ и K₂PrCl₅-KCl.

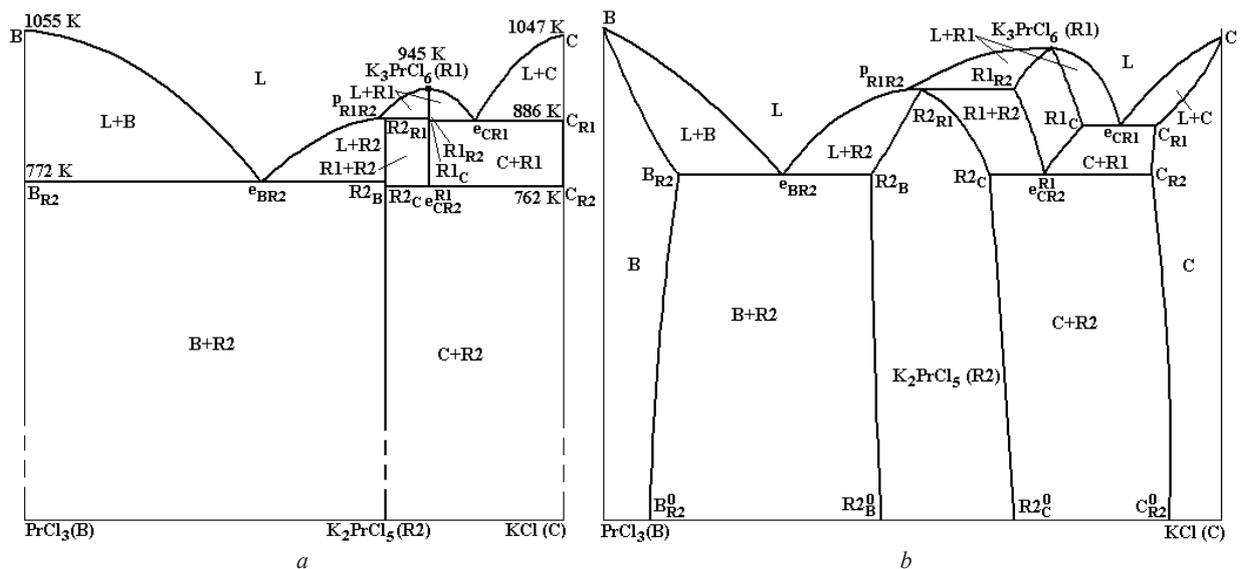


Рис. 1. Диаграмма состояния бинарной системы PrCl₃-KCl (B–C) с соединениями K₃PrCl₆ (R1) и K₂PrCl₅ (R2): модель (а) и прототип (b)

Fig. 1. The PrCl₃-KCl (B–C) binary system phase diagram with compounds K₃PrCl₆ (R1) and K₂PrCl₅ (R2): model (a) and prototype (b)

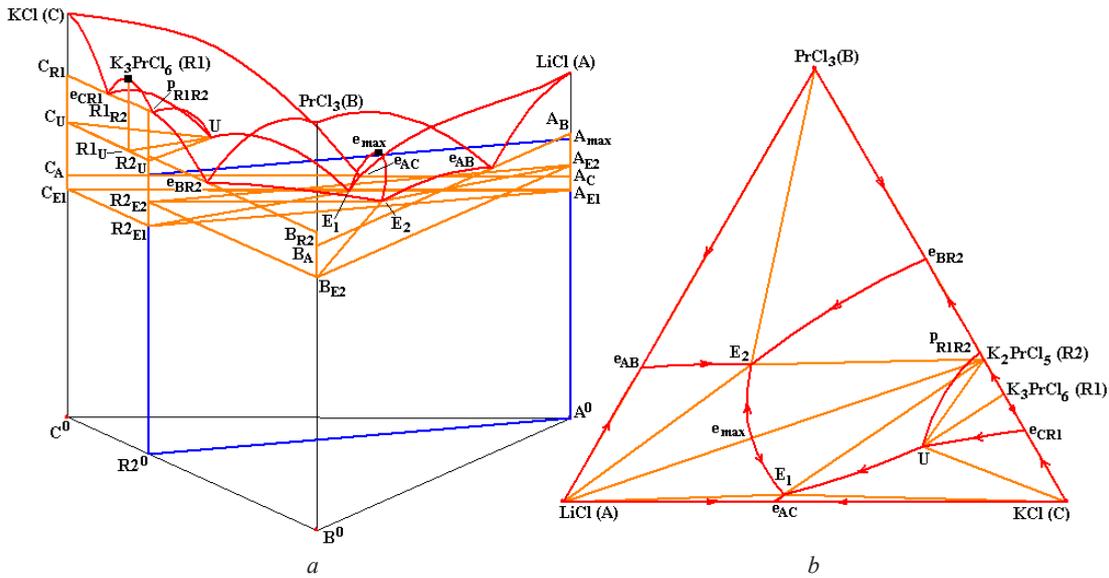


Рис. 2. Компьютерная 3D-модель фазовой диаграммы LiCl-PrCl₃-KCl (A-B-C): T-x-y (a) и x-y (b) проекции
 Fig. 2. 3D computer model of the LiCl-PrCl₃-KCl (A-B-C) phase diagram: T-x-y (a) and x-y (b) projections

В тройной системе LiCl-PrCl₃-KCl (A-B-C)¹ соединение K₃PrCl₆ (R1) разлагается на KCl (C) и K₂PrCl₅ (R2) при той же температуре 762 К, что и в двойной [8, 9]. В соответствующей нонвариантной реакции участвует еще и расплав L: K₃PrCl₆+L→KCl+K₂PrCl₅. Ниже будет показано, что эта реакция лишь формально выглядит как квазиперитектическая (Q) (некоторые ученые ее называют псевдоперитектической и обозначают буквой P [8]), однако она фактически таковой не является, поэтому в 3D-модели это отличие подчеркивается буквой U.

Ниже 762 К после нонвариантной реакции U триангуляция дает две подсистемы: LiCl-PrCl₃-K₂PrCl₅ и LiCl-K₂PrCl₅-KCl (или A-B-R2 и A-R2-C) (рис. 2, a), в каждой из которых имеют место две эвтектические реакции: E₂: L→LiCl+PrCl₃+K₂PrCl₅ (или E₂: L→A+B+R2) в первой из названных подсистем, вторая – E₁: L→LiCl+KCl+K₂PrCl₅ (или E₁: L→A+C+R2) – во второй (рис. 2, b).

Методы. Построение 3D-модели обычно происходит в три этапа: схема моно- и нонвариантных состояний, построение прототипа, перевод прототипа в модель фазовой диаграммы реальной системы [10, 11]. Однако в данном случае фазовая диаграмма проста и можно обойтись без схемы моно- и нонвариантных состояний для того, чтобы понять геометрическое строение фазовой диаграммы: пяти поверхностям ликвидуса соответствуют пять поверхностей солидуса, которые попарно ограничивают двухфазные области L+I (где I – A, B, C, R1, R2); семь моновариантных линий ликвидуса участвуют в формировании семи триад линейчатых поверхностей – границ семи трехфазных областей с расплавом: L+A+B (e_{AB}E₂), L+A+C (e_{AC}E₁), L+A+R2 (E₁E₂), L+B+R2 (e_{BR2}E₂), L+C+R1 (e_{CR1}U), L+C+R2 (UE₁), L+R1+R2 (p_{R1R2}U); ниже трех горизонтальных комплексов в соответствии с окончанием нонвариантных реакций U, E₁, E₂ формируются три твердофазные трехфазные области C+R1+R2 (ниже U), A+ C+R2 (ниже E₁), A+B+R2 (ниже E₂). Формальным перебором можно получить перечень двухфазных областей A+B, A+C, A+R2, B+R2, C+R1, C+R2, R1+R2, границами которых являются поверхности сольвуса. Таким образом, прототип фазовой диаграммы состоит из 66 поверхностей (табл. 1) и 27 фазовых областей (табл. 2).

Значительно упрощает геометрию фазовой диаграммы реальной системы тот факт, что исходные хлориды обладают нулевыми областями гомогенности, а оба соединения R1 и R2 являются стехиометрическими (табл. 3). Именно поэтому из всех 66 поверхностей вырождаются 35, в том числе 5 поверхностей солидуса и 14 – сольвуса трансформируются во фрагменты вертикальных осей на составах A, B, C, R1, R2, а остальные 16 – во фрагменты либо граней тригональ-

¹ Программа PD Designer, которая позволяет строить 3D-модели, требует переобозначения исходных компонентов, в результате которого LiCl обозначается буквой A, PrCl₃ – B, KCl – C, а соединения K₃PrCl₆ и K₂PrCl₅ – соответственно R1 и R2.

ной призмы, либо вертикальной плоскости A–R2. И из всех 27 фазовых областей в вертикальные оси вырождаются все 5 однофазных областей, остальные 8 сливаются с гранями призмы или с плоскостью A–R2, а область C+R1+R2 – с горизонтальным отрезком C_{R2}R2_C (см. рис. 1, а), соответствующим разложению K₃PrCl₆ (R1) на KCl (C) и K₂PrCl₅ (R2) в бинарной системе PrCl₃-KCl (B–C).

Таблица 1. Поверхности фазовой диаграммы LiCl-PrCl₃-KCl (A–B–C) с конгруэнтно K₃PrCl₆ (R1) и инконгруэнтно K₂PrCl₅ (R2) плавящимися соединениями (рис. 2)*

Table 1. Surfaces of the LiCl-PrCl₃-KCl (A–B–C) phase diagram with congruently K₃PrCl₆ (R1) and incongruently K₂PrCl₅ (R2) melting compounds (Figure 2)*

№	Обозначение поверхности	Контур поверхности	№	Обозначение поверхности	Контур поверхности
Ликвидус-солидус					
1	q _A	Ae _{AB} E ₂ e _{max} E ₁ e _{AC}	6	s _A [*]	AA _B A _{E2} A _{max} A _{E1} A _C
2	q _B	Be _{AB} E ₂ e _{BR2}	7	s _B [*]	BB _A B _{E2} B _{R2}
3	q _C	Ce _{AC} E ₁ Ue _{CR1}	8	s _C [*]	CC _A C _{E1} C _U C _{R1}
4	q _{R1}	Up _{R1R2} R ₁ e _{CR1}	9	s _{R1} [*]	R1 _U R1 _{R2} R1R1 _C
5	q _{R2}	UE ₁ e _{max} E ₂ e _{BR2} p _{R1R2}	10	s _{R2} [*]	R2 _U R2 _{E1} R2 _{max} R2 _{E2} R2 _B R2 _{R1}
Сольвус					
11	v _{AB} [*]	A _B A _{E2} A ₀ E ₂ A ₀ B	18	v _{BA} [*]	B _A B _{E2} B ₀ E ₂ B ₀ A
12	v _{AC} [*]	A _C A _{E1} A ₀ E ₁ A ₀ C	19	v _{CA} [*]	C _A C _{E1} C ₀ E ₁ C ₀ A
13	v _{AR2} [*]	A _{E1} A _{max} A _{E2} A ₀ E ₂ A ₀ E ₁	20	v _{R2A} [*]	R2 _{E1} R2 _{max} R2 _{E2} R2 ₀ E ₂ R2 ₀ E ₁
14	v _{BR2} [*]	B _{R2} B _{E2} B ₀ E ₂ B ₀ R2	21	v _{R2B} [*]	R2 _B R2 _{E2} R2 ₀ E ₂ R2 ₀ B
15	v _{CR1} [*]	C _{R1} C _U C _{R2}	22	v _{R1C} [*]	R1 _C R1 _U e ^{R1} _{CR2}
16	v _{CR2} [*]	C _{R2} C _U C _{E1} C ₀ E ₁ C ₀ R2	23	v _{R2C} [*]	R2 _C R2 _U R2 _{E1} R2 ₀ E ₁ R2 ₀ C
17	v _{R1R2} [*]	e ^{R1} _{CR2} R1 _{R2} R1 _U	24	v _{R2R1} [*]	R2 _C R2 _{R1} R2 _U
Линейчатые поверхности					
25	q ^r _{AB}	e _{AB} E ₂ A _{E2} A _B	40	q ^r _{AC}	e _{AC} E ₁ A _{E1} A _C
26	q ^r _{BA}	e _{AB} E ₂ B _{E2} B _A	41	q ^r _{CA}	e _{AC} E ₁ C _{E1} C _A
27	s ^r _{AB} [*]	A _B B _A B _{E2} A _{E2}	42	s ^r _{AC} [*]	A _C C _A C _{E1} A _{E1}
28	q ^r _{AR2}	E ₂ e _{max} E ₁ A _{E1} A _{max} A _{E2}	43	q ^r _{BR2}	e _{BR2} E ₂ B _{E2} B _{R2}
29	q ^r _{R2A}	E ₂ e _{max} E ₁ R2 _{E1} R2 _{max} R2 _{E2}	44	q ^r _{R2B}	e _{BR2} E ₂ R2 _{E2} R2 _B
30	s ^r _{AR2} [*]	A _{E1} A _{max} A _{E2} R2 _{E2} R2 _{max} R2 _{E1}	45	s ^r _{BR2} [*]	B _{R2} B _{E2} R2 _{E2} R2 _B
31	q ^r _{CR1}	e _{CR1} U _C C _{R1}	46	q ^r _{CR2}	UE ₁ C _{E1} C _U
32	q ^r _{RIC}	e _{CR1} U _{R1} U _{R1} C	47	q ^r _{R2C}	UE ₁ R2 _{E1} R2 _U
33	s ^r _{CR1} [*]	C _{R1} R1 _C R1 _U C _U	48	s ^r _{CR2} [*]	C _U C _{E1} R2 _{E1} R2 _U
34	q ^r _{R1R2}	p _{R1R2} U _{R1} U _{R1} R2	49	v ^r _{CR1 U} [*]	e ^{R1} _{CR2} R1 _U C _U C _{R2}
35	q ^r _{R2R1}	p _{R1R2} U _{R2} U _{R2} R1	50	v ^r _{R1R2 U} [*]	e ^{R1} _{CR2} R1 _U R2 _U R2 _C
36	s ^r _{R1R2} [*]	R1 _{R2} R1 _U R2 _U R2 _{R1}	51	v ^r _{CR2 U} [*]	C _{R2} C _U R2 _U R2 _C
37	v ^r _{AC E1} [*]	A _{E1} A ₀ E ₁ C ₀ E ₁ C _{E1}	52	v ^r _{AB E2} [*]	A _{E2} A ₀ E ₂ B ₀ E ₂ B _{E2}
38	v ^r _{AR2 E1} [*]	A _{E1} R2 _{E1} R2 ₀ E ₁ A ₀ E ₁	53	v ^r _{AR2 E2} [*]	A _{E2} R2 _{E2} R2 ₀ E ₂ A ₀ E ₂
39	v ^r _{CR2 E1} [*]	C _{E1} C ₀ E ₁ R2 ₀ E ₁ R2 _{E1}	54	v ^r _{BR2 E2} [*]	B _{E2} B ₀ E ₂ R2 ₀ E ₂ R2 _{E2}
Горизонтальные симплексы					
55	h ^{E1} _{ACR2}	A _{E1} C _{E1} R2 _{E1}	61	h ^{E2} _{ABR2}	A _{E2} B _{E2} R2 _{E2}
56	h _{ACE1}	A _{E1} C _{E1} E ₁	62	h _{ABE2}	A _{E2} B _{E2} E ₂
57	h _{AR2E1}	A _{E1} R2 _{E1} E ₁	63	h _{AR2E2}	A _{E2} R2 _{E2} E ₂
58	h _{CR2E1}	C _{E1} R2 _{E1} E ₁	64	h _{BR2E2}	B _{E2} R2 _{E2} E ₂
59	h ^U _{CR1R2}	C _U R1 _U R2 _U	65	h _{CR2U}	C _U R2 _U U
60	h _{CR1U}	C _U R1 _U U	66	h _{R1R2U}	R1 _U R2 _U U

* Поверхности, вырожденные на фазовой диаграмме реальной системы.

Построение 3D-модели осуществляется путем сборки трехмерного объекта из поверхностей и/или фазовых областей. Несмотря на то что в данном случае их количество сокращается до 31 поверхности и 14 фазовых областей, задачу можно еще упростить, воспользовавшись специальным электронным справочником 3D-моделей фазовых диаграмм различных топологических типов.

Фазовые диаграммы с двойными соединениями обсуждаются в монографиях [7, 12–18], особенно подробно в работе К. А. Халдоияниди [7]. С опорой в основном на эти работы построены компьютерные 3D-модели фазовых диаграмм тройных систем, объединенные в справочник [19, 20], который, в частности, содержит 3D-модели фазовых диаграмм с бинарными и тройными соединениями, плавящимися ин- или конгруэнтно, с эндо- и экзотермическими промежуточными фазами.

Таблица 2. Фазовые области системы LiCl-PrCl₃-KCl (A-B-C) с конгруэнтно K₃PrCl₆ (R1) и инконгруэнтно K₂PrCl₅ (R2) плавящимися соединениями*

Table 2. Phase regions of the LiCl-PrCl₃-KCl (A-B-C) system with congruently K₃PrCl₆ (R1) and incongruently K₂PrCl₅ (R2) melting compounds*

№	Фазовая область	Ограничающие поверхности	Соседние фазовые области
1	L+A	q _A , s _A [*] , q _{AB} ^f , q _{AC} ^f , q _{AR2} ^f	L, A*, L+A+B, L+A+C, L+A+R2
2	L+B	q _B , s _B [*] , q _{BA} ^f , q _{BR2} ^f	L, B*, L+A+B, L+B+R2
3	L+C	q _C , s _C [*] , q _{CA} ^f , q _{CR1} ^f , q _{CR2} ^f	L, C*, L+A+C, L+C+R1, L+C+R2
4	L+R1	q _{R1} , s _{R1} [*] , q _{RIC} ^f , q _{R1R2} ^f	L, R1*, L+C+R1, L+R1+R2
5	L+R2	q _{R2} , s _{R2} [*] , q _{R2A} ^f , q _{R2B} ^f , q _{R2C} ^f , q _{R2R1} ^f	L, R2*, L+A+R2, L+B+R2, L+C+R2, L+R1+R2
6	A*	s _A [*] , v _{AB} [*] , v _{AC} [*] , v _{AR2} [*]	L+A, A+B*, A+C*, A+R2*
7	B*	s _B [*] , v _{BA} [*] , v _{BR2} [*]	L+B, A+B*, B+R2*
8	C*	s _C [*] , v _{CA} [*] , v _{CR1} [*] , v _{CR2} [*]	L+C, A+C*, C+R1*, C+R2*
9	R1*	s _{R1} [*] , v _{RIC} [*] , v _{R1R2} [*]	L+R1, C+R1*, R1+R2*
10	R2*	s _{R2} [*] , v _{R2A} [*] , v _{R2B} [*] , v _{R2C} [*] , v _{R2R1} [*]	L+R2, A+R2*, B+R2*, C+R2*, R1+R2*
11	L+A+B	q _{AB} ^f , q _{BA} ^f , s _{AB} ^f , h _{ABE2}	L+A, L+B, A+B*, L+A+B+R2
12	L+A+C	q _{AC} ^f , q _{CA} ^f , s _{AC} ^f , h _{ACE1}	L+A, L+C, A+C*, L+A+C+R2
13	L+A+R2	q _{AR2} ^f , q _{R2A} ^f , s _{AR2} ^f , h _{AR2E1} , h _{AR2E2}	L+A, L+R2, A+R2*, L+A+B+R2, L+A+C+R2
14	L+B+R2	q _{BR2} ^f , q _{R2B} ^f , s _{BR2} ^f , h _{BR2E2}	L+B, L+R2, B+R2*, L+A+B+R2
15	L+C+R1	q _{CR1} ^f , q _{RIC} ^f , s _{CR1} ^f , h _{CR1U}	L+C, L+R1, C+R1*, L+C+R1+R2
16	L+C+R2	q _{CR2} ^f , q _{R2C} ^f , s _{CR2} ^f , h _{CR2U} , h _{CR2E1}	L+C, L+R2, C+R2*, L+C+R1+R2, L+A+C+R2
17	L+R1+R2	q _{R1R2} ^f , q _{R2R1} ^f , s _{R1R2} ^f , h _{R1R2U}	L+R1, L+R2, R1+R2*, L+C+R1+R2
18	A+B*	v _{AB} [*] , v _{BA} [*] , s _{AB} ^f , v _{AB E2} [*]	A*, B*, L+A+B, A+B+R2
19	A+C*	v _{AC} [*] , v _{CA} [*] , s _{AC} ^f , v _{AC E1} [*]	A*, C*, L+A+C, A+C+R2
20	A+R2*	v _{AR2} [*] , v _{R2A} [*] , s _{AR2} ^f , v _{AR2 E1} [*] , v _{AR2 E2} [*]	A*, R2*, L+A+R2, A+B+R2, A+C+R2
21	B+R2*	v _{BR2} [*] , v _{R2B} [*] , s _{BR2} ^f , v _{BR2 E2} [*]	B*, R2*, L+B+R2, A+B+R2
22	C+R1*	v _{CR1} [*] , v _{RIC} [*] , s _{CR1} ^f , v _{CR1 U} [*]	C*, R1*, L+C+R1, C+R1+R2*
23	C+R2*	v _{CR2} [*] , v _{R2C} [*] , s _{CR2} ^f , v _{CR2 U} [*] , v _{CR2 E1} [*]	C*, R2*, L+C+R2, A+C+R2, C+R1+R2*
24	R1+R2*	v _{R1R2} [*] , v _{R2R1} [*] , s _{R1R2} ^f , v _{R1R2 U} [*]	R1*, R2*, L+R1+R2, C+R1+R2*
25	A+B+R2	v _{AB E2} [*] , v _{AR2 E2} [*] , v _{BR2 E2} [*] , h _{ABR2} ^{E2}	A+B*, A+R2*, B+R2*, L+A+B+R2
26	A+C+R2	v _{AC E1} [*] , v _{AR2 E1} [*] , v _{CR2 E1} [*] , h _{ACR2} ^{E1}	A+C*, A+R2*, C+R2*, L+A+C+R2
27	C+R1+R2*	v _{CR1 U} [*] , v _{CR2 U} [*] , v _{R1R2 U} [*] , h _{CR1R2} ^U	C+R1*, C+R2*, R1+R2*, L+C+R1+R2

* Поверхности и фазовые области, вырожденные на фазовой диаграмме реальной системы.

При создании справочника был проведен подробный обзор фазовых диаграмм различной топологии [20], в том числе с выяснением с помощью компьютерных 3D-моделей неточностей или несоответствий, замеченных разными учеными [7, 12–18]).

Во-первых, образование двух бинарных инконгруэнтно плавящихся соединений, в том числе в одной бинарной системе или в двух разных на противоположных сторонах концентрационного

треугольника (такой вариант в [7] не рассматривается); расположенных антибатно; прилегающих к одной вершине, но в двух вариантах: либо эвтектической реакции предшествуют две квазиперитектические, либо за квазиперитектической реакцией следует эвтектическая в одной подсистеме, а вторая эвтектика имеет место во второй подсистеме.

Во-вторых, твердофазное разложение $L + R \rightarrow A + B$ на исходные компоненты А и В конгруэнтно плавящегося бинарного соединения R на фазовой диаграмме с «выклиниванием» его поля ликвидуса происходит совместно с индифферентной жидкой фазой L (при некой температуре T_U), которое затем в интервале температур $T_U - T_E$ кристаллизуется по эвтектической реакции $L \rightarrow A + B$ (здесь T_U – нижняя температура существования промежуточной фазы R, которая по принятой в термодинамике классификации относится к эндотермическим соединениям [7, с. 218]). Так как невариантное превращение не является квазиперитектическим с образованием (разложением) промежуточной фазы, то соответствующая расплаву тройная точка обозначается не Q, а U. Несмотря на то что R – соединение конгруэнтно плавящееся, связанный с ним разрез не является квазибинарным и триангуляция происходит лишь в ограниченном температурном диапазоне.

В-третьих, твердофазное разложение промежуточной (инконгруэнтно плавящейся) фазы $R \rightarrow A + B + L$ происходит в присутствии пассивной жидкой фазы L (при некой температуре T_Y) на исходные компоненты А и В, которые затем в интервале температур $T_Y - T_E$ кристаллизуются по эвтектической реакции $L \rightarrow A + B$. Так как невариантное превращение не является перитектическим с образованием (разложением) промежуточной фазы, то соответствующая расплаву тройная точка обозначается не P, а Y.

В-четвертых, эндотермическое соединение существует в ограниченном интервале температур и разлагается в поле кристаллизации одного из компонентов.

Таблица 3. Координаты (составы z_1, z_2, z_3 в мольных долях и температура в К) базовых точек (рис. 2) фазовой диаграммы системы LiCl-PrCl₃-KCl (A-B-C) с конгруэнтно K₃PrCl₆ (R1) и инконгруэнтно K₂PrCl₅ (R2) плавящимися соединениями [8, 9] в соответствии с температурным рядом $B > C > R1 > P_{R1R2} > e_{CR1} > A > e_{BR2} > e_{CR2}^{R1} = U > e_{AB} > e_{max} > E_2 > e_{AC} > E_1$

Table 3. Coordinates (concentrations z_1, z_2, z_3 in mole fractions and temperature T in K) of base points (Figure 2) of the system LiCl-PrCl₃-KCl (A-B-C) with congruently K₃PrCl₆ (R1) and incongruently K₂PrCl₅ (R2) melting compounds [8, 9] in accordance with the temperature series $B > C > R1 > P_{R1R2} > e_{CR1} > A > e_{BR2} > e_{CR2}^{R1} = U > e_{AB} > e_{max} > E_2 > e_{AC} > E_1$

№	Точка	z_1	z_2	z_3	T	№	Точка	z_1	z_2	z_3	T
1	LiCl (A)	1	0	0	879	22	e_{max}	0,552	0,146	0,302	723
2	PrCl ₃ (B)	0	1	0	1055	23	A_{max}	1	0	0	723
3	KCl (C)	0	0	1	1047	24	$R1_{max}$	0	0,330	0,670	723
4	K ₃ PrCl ₆ (R1)	0	0,250	0,750	945						
5	e_{AB}	0,690	0,310	0	737	25	e_{AC}	0,582	0	0,418	625
6	A_B	1	0	0	737	26	A_C	1	0	0	625
7	B_A	0	1	0	737	27	C_A	0	0	1	625
8	P_{R1R2}	0	0,345	0,655	890	28	e_{BR2}	0	0,560	0,440	772
9	$R1_{R2}$	0	0,250	0,750	890	29	B_{R1}	0	1	0	772
10	$R2_{R1}$	0	0,330	0,670	890	30	$R1_B$	0	0,250	0,750	772
11	e_{CR1}	0	0,165	0,835	886	31	e_{CR2}^{R1}	0	0,250	0,750	762
12	C_{R1}	0	0	1	886	32	C_{R2}	0	0	1	762
13	$R1_C$	0	0,330	0,670	886	33	$R2_C$	0	0,330	0,670	762
14	E_1	0,551	0,018	0,431	591	34	E_2	0,468	0,317	0,215	654
15	A_{E1}	1	0	0	591	35	A_{E2}	1	0	0	654
16	$R1_{E1}$	0	0,330	0,670	591	36	B_{E2}	0	1	0	654
17	C_{E1}	0	0	1	591	37	$R1_{E2}$	0	0,330	0,670	654
18	U	0,223	0,127	0,650	762	38	A⁰	1	0	0	0
19	C_U	0	0	1	762	39	B^0	0	1	0	0
20	$R1_U$	0	0,330	0,670	762	40	C^0	0	0	1	0
21	$R2_U$	0	0,250	0,750	762	41	$R2^0$	0	0,250	0,750	0

В-пятых, образование $U: A+B \rightarrow R+L$ и разложение $Y: R \rightarrow A + B + L$ промежуточной фазы R происходит по двум линиям UY , которым соответствуют эвтектическая $L \rightarrow A + R$ и перитектическая $L + B \rightarrow R$ кристаллизации.

В-шестых, образование промежуточной фазы $A + B \rightarrow R + L$ происходит при температуре T_U и затем продолжается в интервалах температур $T_U - T_{E1}$ и $T_U - T_{E2}$ по эвтектическим реакциям $L \rightarrow A + R$ и $L \rightarrow B + R$. Возможны два варианта: в первом после $L \rightarrow A + R$ и $L \rightarrow B + R$ следуют две эвтектики, а во втором – одна эвтектика и одна квазиперитектика.

Отсюда видно, что справочник, в который включены готовые шаблоны большого количества 3D-моделей фазовых диаграмм разнообразных топологических типов, можно использовать для построения компьютерной 3D-модели фазовой диаграммы $LiCl-PrCl_3-KCl$.

Результаты и их обсуждение. Прототип фазовой диаграммы формируется двояко: либо используется готовая 3D-модель из справочника (п. 2 из перечисленных выше геометрических типов фазовых диаграмм, включенных в него), либо он собирается из 66 поверхностей (табл. 1). Сначала строятся три горизонтальные (изотермические) плоскости, соответствующие невариантным реакциям U, E_1, E_2 . Потом к ним подводятся отрезки, которые впоследствии станут направляющими для линейчатых поверхностей – границ трехфазных областей. На полученный каркас наносятся нелинейчатые поверхности ликвидуса, солидуса и т. п.

После перемещения базовых точек согласно реальным координатам (табл. 3) получается компьютерная 3D-модель фазовой диаграммы (рис. 2). Ее можно использовать для построения любых изо- и политермических разрезов и рассчитывать функцию отклика для любого произвольно заданного расплава, то есть температуры начала и окончания соответствующих этапов кристаллизации этого расплава. Однако чтобы воспользоваться этими возможностями 3D-модели, нужно оценить ее качество. Для этого можно рассмотреть варианты одного и того же изотермического разреза: экспериментального [8, 9] (рис. 3, *a*) и модельного (рис. 3, *b*). Их сравнение дает удовлетворительные результаты.

В случае рассматриваемой системы авторы [8, 9] предоставили дополнительную возможность для оценки качества построенной модели: они опубликовали для 33 различных сплавов термограммы, показывающие температуры начала первичной (T_L) и вторичной (T_S) кристаллизации (табл. 4). Например, на термограммах для точек 13, 18, 22 (рис. 4, *d*) на квазибинарном разрезе $LiCl-K_2PrCl_5$ ($A-R2$) (рис. 4, *b*) температуры начала первичной и вторичной кристаллизации можно сравнить с соответствующими точками G_1, G_2, G_3 3D-модели (рис. 4, *a*). Стоит отметить, что разрез $A-R2$ является квазибинарным лишь в некоторой степени, потому что в высокотемпературной его части (выше 762 К) на разрезе проявляются фазовые области первичной $L+R1$ и вторичной $L+R1+R2$ (совместно с соединением $R2$) кристаллизации соединения $R1$ (рис. 4, *c*).

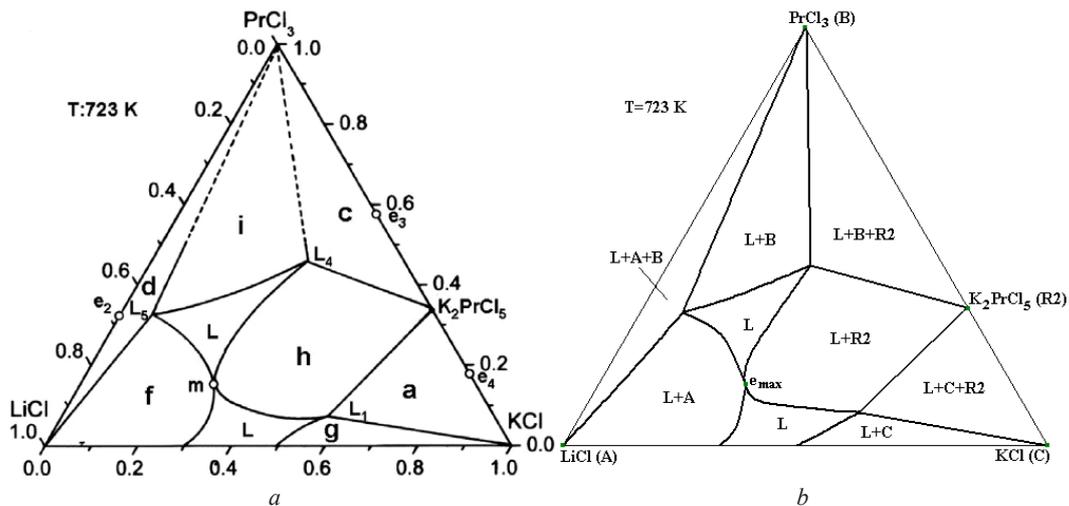


Рис. 3. Изотермический разрез 723 К фазовой диаграммы $LiCl-PrCl_3-KCl$ ($A-B-C$): [9] (*a*), 3D-модели (*b*)

Fig. 3. Isothermal section at 723 K of the $LiCl-PrCl_3-KCl$ ($A-B-C$) phase diagram: [9] (*a*), 3D model (*b*)

Таблица 4. Точки на частично квазибинарном разрезе $\text{LiCl-K}_2\text{PrCl}_5$ (A–R2) (мол. доли, K)*Table 4. Points on the $\text{LiCl-K}_2\text{PrCl}_5$ (A–R2) partially quasibinary section (mol. fraction, K)

Точка	LiCl (A)	PrCl ₃ (B)	KCl (C)	T _L , T _S [9]	T _L , T _S 3D-модели
G ₁ (13)	0,7	0,1	0,2	786, 723	789, 723
G ₂ (18)	0,4	0,2	0,4	792, 723	793, 723
G ₃ (22)	0,1	0,3	0,6	867, 700	869, 723

* Здесь T_L и T_S – температуры начала и окончания первичной кристаллизации [9].

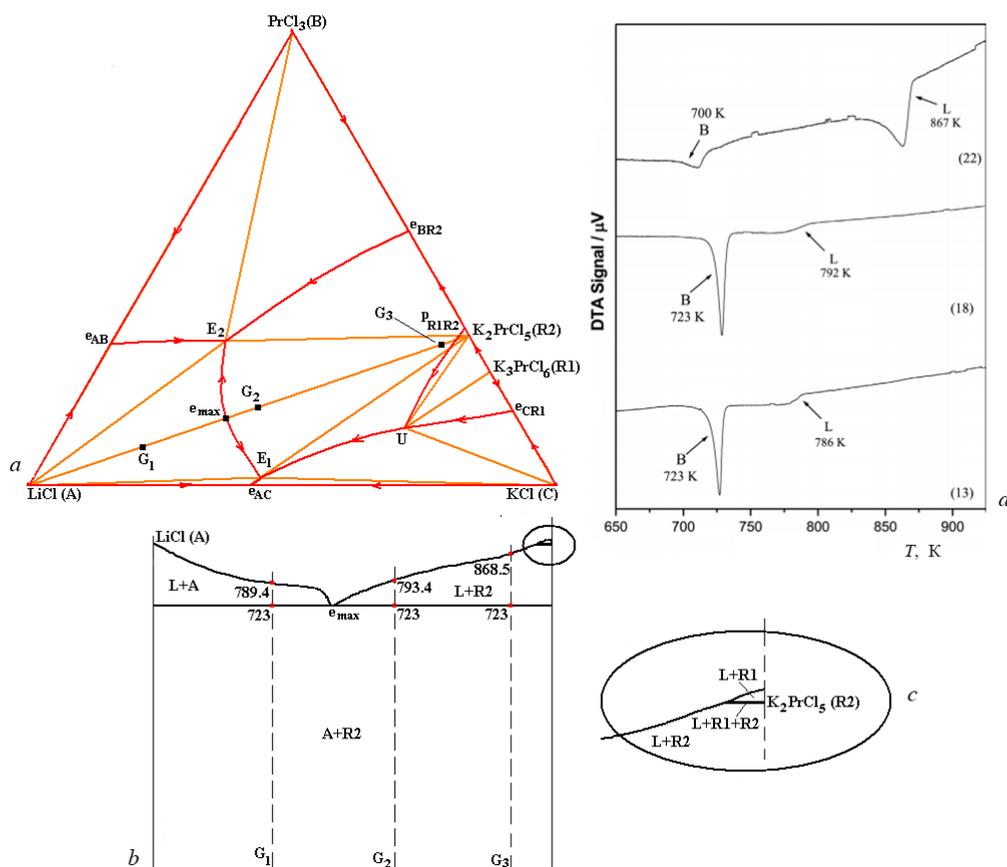


Рис. 4. Коррекция 3D-модели по точкам G₁, G₂, G₃ (a) на частично квазибинарном разрезе $\text{LiCl-K}_2\text{PrCl}_5$ (A–R2) (b) (во врезке (c) с увеличением показаны области первичной и вторичной совместно с K_2PrCl_5 (R2) кристаллизации соединения K_3PrCl_6 (R1)), соответствующим точкам 13, 18, 22, для которых получены термограммы [9] (d)

Fig. 4. Correction of the 3D model by points G₁, G₂, G₃ (a) on the $\text{LiCl-K}_2\text{PrCl}_5$ (A–R2) partially quasibinary section (b) (the inset (c) with magnification shows the areas of primary and secondary crystallization together with K_2PrCl_5 (R2) of the compound K_3PrCl_6 (R1)), corresponding to DTA traces of the samples 13, 18, 22 [9] (d)

При сравнении видно (табл. 4), что точки на линиях ликвидуса дают близкие значения температур начала первичной кристаллизации, однако температура ее окончания (в данном случае постоянная и равная 723 К – температуре в точке e_{\max} – эвтектике на разрезе A–R2 в его квазибинарной части) не меняется в 3D-модели, но значительно меньше в точке 22 на термограмме [9] (рис. 4, d), что говорит о неточности эксперимента для этого состава.

Заключение. Продолжается изучение закономерностей строения фазовых диаграмм [21]. В применении к системе $\text{LiCl-PrCl}_3\text{-KCl}$ это важно как с точки зрения наглядной иллюстрации физико-химических и геометрических особенностей строения фазовых диаграмм тройных систем с бинарными соединениями различной природы, так и применительно к системам, используемые в работе с топливом ядерных реакторов.

Изобарная фазовая диаграмма системы LiCl-PrCl₃-KCl обобщает полученные экспериментально данные [8, 9] по этой системе, удовлетворительно их воспроизводя, о чем говорит сравнение экспериментального и модельного изотермических разрезов при 723 К, а также экспериментальных термограмм и соответствующих расплавов, составы которых сгруппированы на частично квазибинарном разрезе из LiCl в точку, соответствующую составу соединения K₂PrCl₅ (при этом из 3D-модели, созданной строго в соответствии с правилами построения фазовых диаграмм, видно, что термограмма для одного из расплавов показывает неверное значение температуры окончания его первичной кристаллизации).

Благодарности. Исследование выполнено в соответствии с госзадаанием ФГБУН ИФМ СО РАН, проект № 0270-2021-0002.

Acknowledgements. This work has been performed under the program of fundamental research SB RAS (project 0270-2021-0002).

Список использованных источников

1. Двойная система LiCl-KCl / А. С. Басин [и др.] // Журн. неорг. химии. – 2008. – Т. 53, № 9. – С. 1611–1613.
2. Galashev, A. Y. Processing of Fast Neutron Reactor Fuel by Electrorefining: Thematic overview / A. Y. Galashev // Int. J. Energy Res. – 2020. – Vol. 45, № 8. – С. 11459–11478. <https://doi.org/10.1002/er.6267>
3. Electrochemical studies based on the extraction of Zr on Cu electrode in the LiCl-KCl molten salt / L. Ding [et al.] // Sep. Purif. Technol. – 2021. – Vol. 279. – P. 119683. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2021.119683>
4. Kim, I.-S. Phase diagrams for binary systems, NdCl₃-LiCl and PrCl₃-LiCl / I.-S. Kim, Y. Okamoto. – Tokai: Japan atomic energy research inst., 1999. – 16 p.
5. Seifert, H. J. Stability of Double Chlorides in the Systems ACl/PrCl₃ (A = Na, Cs) / H. J. Seifert, J. Sandrock, J. Uebach // Z. Anorg. Allg. Chem. – 1987. – Vol. 555, iss. 12. – P. 143–153. <https://doi.org/10.1002/zaac.19875551215>
6. Seifert, H. J. Ternary chlorides of the trivalent early lanthanides. Phase diagrams, crystal structures and thermodynamic properties / H. J. Seifert // J. Therm. Anal. Calorim. – 2002. – Vol. 67. – P. 789–826. <https://doi.org/10.1023/A:1014341829611>
7. Халдояниди, К. А. Фазовые диаграммы гетерогенных систем с трансформациями / К. А. Халдояниди. – Новосибирск: ИНХ СО РАН, 2004. – 382 с.
8. Ghosh, S. Thermochemical Studies of Alloys and Molten Halide Salts of Relevance to Pyrochemical Reprocessing of Metallic Fuel [Electronic resource] / S. Ghosh. – Homi Bhabha National Institute, 2016. – Made of access: <https://shodhganga.inflibnet.ac.in/handle/10603/308733>.
9. Study of phase equilibria in LiCl-KCl-PrCl₃ pseudo-ternary system / S. Ghosh [et al.] // Thermochim. Acta. – 2017. – Vol. 653. – P. 16–26. <https://doi.org/10.1016/j.tca.2017.03.024>
10. Парфенова, М. Д. 3D компьютерная модель T-x-y диаграммы Ag-Cu-Ni: Верификация разрезов в Атласе фазовых диаграмм для бессвинцовых припоев / М. Д. Парфенова, В. П. Воробьева, В. И. Луцкык // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. хім. навук. – 2021. – Т. 57, № 1. – С. 15–24. <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2021-57-1-15-24>
11. Парфенова, М. Д. Оценка влияния разложения твердого раствора алюминия на геометрическое строение изобарной фазовой диаграммы Al-Sn-Zn / М. Д. Парфенова, В. П. Воробьева, В. И. Луцкык // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. хім. навук. – 2022. – Т. 58, № 2. – С. 149–157. <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2022-58-2-149-157>
12. Vogel, R. Die heterogenen Gleichgewichte / R. Vogel. – Leipzig: Akademischeverlagellesschaft, 1959. – 727 S.
13. Аносов, В. Я. Основные начала физико-химического анализа / В. Я. Аносов, С. А. Погодин. – М., Л.: Изд-во АН СССР, 1947. – 876 с.
14. Аносов, В. Я. Основы физико-химического анализа / В. Я. Аносов, М. И. Озерова, Ю. С. Фиалков. – М.: Наука, 1976. – 504 с.
15. Райнз, Ф. Диаграммы фазового равновесия в металлургии / Ф. Райнз. – М.: Металлургиздат, 1960. – 369 с.
16. Prince, A. Alloy Phase Equilibria / A. Prince. – Amsterdam – London – New York: Elsevier Publ. Comp., 1966. – 290 p.
17. Петров, Д. А. Двойные и тройные системы / Д. А. Петров. – М.: Металлургия, 1986. – 256 с.
18. Захаров, А. М. Диаграммы состояния двойных и тройных систем / А. М. Захаров. – М.: Металлургия, 1990. – 240 с.
19. Lutsyk, V. I. Reference Book on the Oxide Systems Space Diagrams as a Tool for Data Mining / V. I. Lutsyk, V. P. Vorob'eva, A. E. Zelenaya // Solid State Phenomena. – 2015. – Vol. 230. – P. 51–54. doi: 10.4028/www.scientific.net/SSP.230.51
20. Воробьева, В. П. Фазовые диаграммы состояния трех- и четырехкомпонентных систем: от топологии к компьютерным моделям: дис. ... д-ра физ.-матем. наук: 02.00.04/ В. П. Воробьева. – Тюмень, 2012. – 354 с.
21. Вечер, А. А. Местоположение линий эвтектики в тройных системах / А. А. Вечер // Докл. АН БССР. – 1983. – Т. 27, № 1. – С. 59–62.

References

1. Basin A. S., Kaplun A. B., Meshalkin A. B., Uvarov N. F. The LiCl-KCl Binary System. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2008, vol. 53, no. 9, pp. 1509–1511 (in Russian). <https://doi.org/10.1134/S003602360809026X>.
2. Galashev A. Y. Processing of Fast Neutron Reactor Fuel by Electrorefining: Thematic overview. *International Journal of Energy Research*, 2020, vol. 45, no 8, pp. 11459–11478. <https://doi.org/10.1002/er.6267>.
3. Ding L., Yan Y., Smolenski V., Novoselova A., Xue Y., Ma F., Zhang M. Electrochemical Studies Based on the Extraction of Zr on Cu Electrode in the LiCl-KCl Molten Salt. *Separation and Purification Technology*, 2021, vol. 279, pp. 119683. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2021.119683>

4. Kim I. S., Okamoto Y. *Phase Diagrams for Binary Systems, NdCl₃-LiCl and PrCl₃-LiCl*. Tokai, Japan atomic energy research inst., 1999. 16 p.
5. Seifert H. J., Sandrock J., Uebach J. Stability of Double Chlorides in the Systems ACl/PrCl₃ (A = Na, Cs). *Zeitschrift fur Anorganische and Allgemeine Chemie*, 1987, vol. 555, iss. 12, pp. 143–153. <https://doi.org/10.1002/zaac.19875551215>
6. Seifert H. J. Ternary Chlorides of the Trivalent Early Lanthanides. Phase Diagrams, Crystal Structures and Thermodynamic Properties. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2002, vol. 67, pp. 789–826. <https://doi.org/10.1023/A:1014341829611>
7. Khaldoyanidi K. A. *Phase Diagrams of Heterogeneous Systems with Transformations*, Novosibirsk, Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, 2004. 382 p. (in Russian)
8. Ghosh S. *Thermochemical Studies of Alloys and Molten Halide Salts of Relevance to Pyrochemical Reprocessing of Metallic Fuel*. Homi Bhabha National Institute, 2016. Available at: <https://shodhganga.inflibnet.ac.in/handle/10603/308733>.
9. Ghosh S., Ganesan R., Sridharan R., Gnanasekaran T. Study of Phase Equilibria in LiCl-KCl-PrCl₃ Pseudo-Ternary System. *Thermochimica Acta*, 2017, vol. 653, pp. 16–26. <https://doi.org/10.1016/j.tca.2017.03.024>
10. Parfenova M. D., Vorob'eva V. P., Lutsyk V. I. 3D Computer Model of the Ag-Cu-Ni T-x-y Diagram: Verification of Sections in the Atlas of Phase Diagrams for Lead-Free Soldering. *Vestsi Natsyyanal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya khimichnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus, Chemical Series*, 2021, vol. 57, no. 1, pp. 15–24 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2021-57-1-15-24>.
11. Parfenova M. D., Vorob'eva V.P., Lutsyk V.I. Assessment of Effects of Aluminum Solid Solution Decomposition on Geometric Structure of Al-Sn-Zn Isobar Phase Diagram by its 3D Computer Model. *Vestsi Natsyyanal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya khimichnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus, Chemical Series*, 2022, vol. 58, no. 2, pp. 149–157 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2022-58-2-149-157>.
12. Vogel R. *Die heterogenen Gleichgewichte*. Leipzig: Akademischeverlagellesschaft Geest & Portig, 1959. 727 S.
13. Anosov V. Ya., Pogodin S. A. *Main Principles of Physicochemical Analysis*. Moscow, Leningrad, USSR Academy Sciences publ., 1947. 876 p. (in Russian).
14. Anosov V. Ya., Ozerova M. I., Fialkov Yu. S. *Fundamentals of Physicochemical Analysis*. Moscow, Nauka = Science Publ., 1976. 504 p. (in Russian).
15. Rhines F. N. *Phase Diagrams in Metallurgy*. Their development and application. McGraw-Hill Book Company, MC. New York – Toronto – London, 1956. 340 p.
16. Prince A. *Alloy Phase Equilibria*. Elsevier Publ. Comp., Amsterdam – London – New York, 1966. 290 p.
17. Petrov D. A. *Binary and Ternary Systems*. Moscow, Metallurgy, 1986, 256 p. (in Russian).
18. Zakharov A. M. *State Diagrams of Binary and Ternary Systems*. Moscow, Metallurgy, 1990, 240 p. (in Russian).
19. Lutsyk V. I., Vorob'eva V.P., Zelenaya A.E. Reference Book on the Oxide Systems Space Diagrams as a Tool for Data Mining. *Solid State Phenomena*, 2015, vol. 230, pp. 51–54. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.230.51>.
20. Vorob'eva V. P. *State Phase Diagrams of Three- and Four-component Systems: from Topology to Computer Models*. Tyumen, 2012. 354 p. (in Russian).
21. Vecher A. A. Location of Eutectic Lines in Ternary Systems. *Reports of the Academy of Sciences of the Belarus SSR*, 1983, vol. 27, no. 1, pp. 59–62 (in Russian).

Информация об авторах

Парфенова Мария Дмитриевна – аспирант. Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ул. Сахьяновой, 6, Улан-Удэ, Республика Бурятия, Россия). Email: krygentul@gmail.com

Воробьева Вера Павловна – доктор физико-математических наук, доцент, ведущий научный сотрудник. Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ул. Сахьяновой, 6, Улан-Удэ, Республика Бурятия, Россия). Email: vvorobjeva@mail.ru

Луцук Василий Иванович – доктор химических наук, профессор, заведующий сектором. Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ул. Сахьяновой, 6, Улан-Удэ, Республика Бурятия, Россия). Email: vluts@ipms.bsnet.ru

Зеленая Анна Эдуардовна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник. Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ул. Сахьяновой, 6, Улан-Удэ, Республика Бурятия, Россия). Email: zel_ann@mail.ru

Балданов Виктор Дашиевич – аспирант. Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ул. Сахьяновой, 6, Улан-Удэ, Республика Бурятия, Россия). Email: victor_baldanov@mail.ru

Information about the authors

Parfenova Maria D. – Postgraduate Student. Institute of Physical Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (6, Sakhyanova Str., Ulan-Ude, Republic of Buryatia, Russia). Email: krygentul@gmail.com

Vorob'eva Vera P. – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Leading researcher. Institute of Physical Materials Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (6, Sakhyanova Str., Ulan-Ude, Republic of Buryatia, Russia). Email: vvorobjeva@mail.ru

Lutsyk Vasily I. – Dr. Sc. (Chemistry), Professor, Head of the sector. Institute of Physical Materials Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (6, Sakhyanova str., Ulan-Ude, Republic of Buryatia, Russia). Email: vluts@ipms.bsnet.ru

Zelenaya Anna E. – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior researcher. Institute of Physical Materials Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (6, Sakhyanova Str., Ulan-Ude, Republic of Buryatia, Russia). Email: zel_ann@mail.ru

Baldanov Victor D. – Postgraduate Student. Institute of Physical Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (6, Sakhyanova Str., Ulan-Ude, Republic of Buryatia, Russia). Email: victor_baldanov@mail.ru