

УДК 536.46+541.124

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛООВОГО ВЗРЫВА В МЕХАНИЧЕСКИ АКТИВИРОВАННЫХ СМЕСЯХ $\text{SiO}_2 + \text{Al}$

О. В. Лапшин, В. К. Смоляков

Отдел структурной макрокинетики Томского научного центра СО РАН, 634021 Томск, overlap@mail.ru

В макроскопическом приближении построена математическая модель синтеза в предварительно механоактивированной смеси $\text{SiO}_2 + \text{Al}$. Показано, что предварительная механоактивация позволяет реализовать твердофазное воспламенение и провести синтез продуктов Al_2O_3 и Si в режиме теплового взрыва. С использованием экспериментальных данных определены теплофизические и термокинетические константы процесса.

Ключевые слова: порошковая смесь, механическая активация, тепловой взрыв.

DOI 10.15372/FGV20160212

ВВЕДЕНИЕ

Механическое активирование смесей конденсированных веществ — эффективный способ повышения скорости химического превращения. Предварительная механическая активация увеличивает реакционную поверхность вследствие измельчения реагентов и повышает реакционную способность в результате образования дефектов структуры, в которых аккумулируется дополнительная (избыточная по сравнению с исходными веществами) энергия [1].

В настоящей работе с целью развития представлений о механическом активировании химических реакций и определения применимости предложенного в [1, 2] макроскопического описания анализируется тепловой взрыв смеси $\text{SiO}_2 + \text{Al}$. Результаты расчета сопоставлены с данными экспериментов [3–6].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Математическое моделирование теплового взрыва смеси $\text{SiO}_2 + \text{Al}$ проведем в два этапа. На первом этапе выпишем необходимые соотношения для определения параметров смеси после механоактивации, на втором — уравнения, описывающие динамику теплового взрыва механоактивированной смеси. Исследование полученной модели проведем численно.

Рассматривается образец, сформованный из предварительно механоактивированной стехиометрической смеси порошковых компонентов SiO_2 и Al, образующих в одностадийной

химической реакции продукт $\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Si}$. Будем полагать, что форму частиц можно описать эквивалентными сферами. Различие плотностей и теплоемкостей исходной смеси и продукта не учитывается ($\rho = \text{const}$). Примем, что $r_{\text{SiO}_2} > r_{\text{Al}}$, где r_i — радиус соответствующего компонента.

На стадии предварительной механоактивации происходят увеличение реакционной поверхности, измельчение и активация частиц реагентов. При построении математической модели будем использовать сформулированные в [1, 2] положения.

Для расчета изменения удельных поверхностей компонентов смеси используются уравнения

$$\frac{ds_i}{dt} = \left(1 - \frac{s_i}{s_{m,i}}\right) k_i, \quad (1)$$

где $i = \text{SiO}_2, \text{Al}$; t — время; $s_i = 3/r_i$ — удельная поверхность частиц компонентов; $s_{m,i}$ — удельная поверхность, максимально достижимая в заданных условиях работы механоактиватора; k_i — размерный коэффициент, характеризующий затраты мощности мельницы на измельчение.

Скорость изменения избыточной энергии в компонентах $i = \text{SiO}_2, \text{Al}$ определяется по соотношениям:

$$\frac{d\varphi_i}{dt} = I_i - \varphi_i^0 y_i \exp\left(-\frac{U_i - \chi_i \varphi_i^0}{RT}\right), \quad (2)$$

$$\varphi_i = \varphi_i^0 [1 - e^{-(T - T_{L,i})}].$$

Здесь T — температура; $T_{L,i}$ — температура плавления; I_i — скорость накопления избыточной энергии в компонентах смеси; U_i — энергия активации процесса релаксации избыточной энергии в реагентах; χ_i — коэффициенты; R — универсальная газовая постоянная; y_i — предэкспоненты; φ_i — избыточная энергия в реагентах; φ_i^0 — избыточная энергия в компонентах до температуры фазового перехода; $e(T - T_{L,i}) = \begin{cases} 0, & T < T_{L,i}, \\ 1, & T \geq T_{L,i}, \end{cases}$ — единичная функция Хевисайда.

Уравнение сохранения энергии в образце в пренебрежении распределением температуры по объему вещества при значениях критерия Био $Bi \ll 1$ и с учетом принятых выше допущений представим следующим образом:

$$\rho \frac{d}{dt} (m_{SiO_2} H_{SiO_2} + m_{Al} H_{Al} + m_{Al_2O_3} H_{Al_2O_3} + m_{Si} H_{Si}) = G, \quad (3)$$

где ρ — плотность, G — функция, характеризующая нагрев образца внешним источником энергии. Относительные массовые концентрации компонентов в смеси возьмем в виде

$$\begin{aligned} m_{SiO_2} &= (1 - c_0)(1 - \alpha), & m_{Al} &= c_0(1 - \alpha), \\ m_{Al_2O_3} &= (1 - c')\alpha, & m_{Si} &= c'\alpha, \end{aligned} \quad (4)$$

где $c_0 = 4a_{Al}/(3a_{Si} + 6a_O + 4a_{Al})$, $c' = 3a_{Si}/(3a_{Si} + 2a_O + 4a_{Al})$ — относительные массовые концентрации соответственно Al в исходной смеси и Si в продукте реакции; α — глубина химического превращения, определенная как массовая доля продукта в реакционной смеси; a_O, a_{Al}, a_{Si} — атомные массы кислорода, алюминия и кремния.

Энтальпии веществ $i = Si, SiO_2, Al, Al_2O_3$ при температуре T имеют вид

$$H_i = H_i(T_0) + \int_{T_0}^T c_i dT, \quad (5)$$

где c_i — теплоемкость компонента, T_0 — начальная температура. В (5) для H_{SiO_2} и H_{Al} учтены избыточные энергии, накопленные на этапе механоактивации. Так как Al и Si — элементы, в (5) можно положить $H_{Al}(T_0) = 0$, $H_{Si}(T_0) = 0$.

Для учета фазового перехода в компонентах $i = Al, Si$ и SiO_2 их теплоемкости представим в виде

$$c_i = c_i^0 + L_i \delta(T - T_{L,i}), \quad (6)$$

где c_i^0 — часть теплоемкости, не зависящая от фазового перехода; L_i — теплота плавления; $\delta(T - T_{L,i}) = \begin{cases} 0, & T \neq T_{L,i}, \\ \infty, & T = T_{L,i} \end{cases}$ — δ -функция Дирака.

В (2), (5) и (6) для корректности учтено возможное плавление реагента SiO_2 , хотя в экспериментах [3–5] максимальная температура теплового взрыва была ниже значения T_{L, SiO_2} .

С учетом (4)–(6) соотношение (3) запишется в виде

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \{ Q_0 - (Q + \Delta H)\alpha + \bar{c}(T - T_0) + \\ + c_0 L_{Al} e(T - T_{L,Al})(1 - \alpha) + c' L_{Si} e(T - T_{L,Si})\alpha + \\ + (1 - c_0) L_{SiO_2} e(T - T_{L,SiO_2})(1 - \alpha) + \varphi \} = \\ = G/\rho, \quad (7) \end{aligned}$$

где

$$Q_0 = (1 - c_0) H_{SiO_2}(T_0),$$

$$Q = Q_0 - (1 - c') H_{Al_2O_3}(T_0),$$

$$\Delta H = [\bar{c} - c_\alpha](T - T_0), \quad \bar{c} = (1 - c_0) c_{SiO_2}^0 + c_0 c_{Al}^0,$$

$$c_\alpha = (1 - c') c_{Al_2O_3} + c' c_{Si}^0,$$

$$e(T - T_{L,Si}) = \begin{cases} 0, & T < T_{L,Si}, \\ 1, & T \geq T_{L,Si}. \end{cases}$$

Избыточная энергия смеси представляет собой среднемассовую сумму избыточных энергий реагентов:

$$\varphi = (1 - c_0)(1 - \alpha)\varphi_{SiO_2} + c_0(1 - \alpha)\varphi_{Al}.$$

Будем полагать, что продукт реакции не наследует содержащиеся в реагентах структурные дефекты и его избыточная энергия равна нулю.

В пренебрежении различием между теплоемкостями исходной смеси и продукта ($\Delta H = 0$) уравнение (7) можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned}
& [\bar{c} + c_0 L_{Al}(1 - \alpha)\delta(T - T_{L,Al}) - c' L_{Si}\delta(T - T_{L,Si})\alpha + \\
& + (1 - c_0)L_{SiO_2}(1 - \alpha)\delta(T - T_{L,SiO_2})] \frac{dT}{dt} = \\
& = [Q + c_0 L_{Al}e(T - T_{L,Al}) + c' L_{Si}e(T - T_{L,Si}) + \\
& + (1 - c_0)L_{SiO_2}e(T - T_{L,SiO_2})] \frac{d\alpha}{dt} - \frac{d\varphi}{dt} + \frac{G}{\rho}. \quad (8)
\end{aligned}$$

Из (8) следует формула для расчета температуры:

$$\begin{aligned}
T = T_0 + \frac{Q}{\bar{c}}\alpha + c_0(1 - \alpha)\frac{L_{Al}}{\bar{c}}e(T - T_{L,Al}) - \\
- c'\alpha\frac{L_{Si}}{\bar{c}}e(T - T_{L,Si}) + \\
+ (1 - c_0)(1 - \alpha)\frac{L_{SiO_2}}{\bar{c}}e(T - T_{L,SiO_2}) + \\
+ \frac{\varphi}{\bar{c}} + \frac{G}{\rho\bar{c}}t. \quad (9)
\end{aligned}$$

Уравнение для скорости химического превращения исходной смеси в продукт реакции с учетом того, что в результате фазового перехода возможно изменение кинетики химической реакции, запишем в виде

$$\frac{d\alpha}{dt} = \begin{cases} \bar{s}_{SiO_2} f_1(\alpha) k_{01} \times \\ \times \exp\left(-\frac{E_1 - [\varphi_{SiO_2}^0(1 - c_0) + \varphi_{Al}^0 c_0]}{RT}\right), & T < T_{L,Al}, \\ \bar{s}_{SiO_2} f_2(\alpha) k_{02} \times \\ \times \exp\left(-\frac{E_2 - \varphi_{SiO_2}^0(1 - c_0)}{RT}\right), & T_{L,Al} < T < T_{L,SiO_2}, \\ \bar{s}_{SiO_2} f_3(\alpha) k_{03} \exp\left(-\frac{E_3}{RT}\right), & T > T_{L,SiO_2}, \end{cases} \quad (10)$$

где $f_i(\alpha)$ — кинетический закон, k_{0i} — предэкспонент, E_i — энергия активации, $i = 1, 2, 3$. Предполагается, что плавление компонента Si не оказывает влияния на вид функции f и

кинетические константы, используемые в (10); $\bar{s}_{SiO_2} = s_{SiO_2}/s_{m,SiO_2}$.

На стадии синтеза динамика релаксации избыточной энергии в реагентах описывается зависимостями (2) при $I_{SiO_2} = I_{Al} = 0$.

Начальные условия:

$$t = 0: \quad T = T_0, \quad \alpha = 0. \quad (11)$$

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ И АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Наряду с допущением о релаксации избыточной энергии в процессе химической реакции, будем считать, что масштаб гетерогенности определяется изменением размера тугоплавкого реагента SiO_2 . Положим $I_{SiO_2} = I_{Al} = I$, $f_1(\alpha) = f_2(\alpha) = f_3(\alpha) = 1$, $E_1 = E_2 = E_3 = E$, $k_{01} = k_{02} = k_{03} = k_0$.

Принятые допущения позволяют сформулировать выше математическую модель переписать в следующем виде: на стадии механоактивации

$$\bar{s}_{SiO_2} = 1 - \exp\left(-\frac{k_{SiO_2} t}{s_{m,SiO_2}}\right), \quad (12)$$

$$\varphi_{SiO_2}^0 = It, \quad \varphi_{Al}^0 = It, \quad (13)$$

в момент завершения механоактивации

$$\varphi_0 = \varphi_{SiO_2}^0 = \varphi_{Al}^0 = It_a,$$

где t_a — время механоактивации; соотношение (12) имеет место в случае, когда удельную поверхность частиц в исходном состоянии (до измельчения) можно считать пренебрежимо малой ($\bar{s}_{SiO_2} \approx 0$);

на стадии синтеза

$$\begin{aligned}
& \left[1 + c_0 \frac{L_{Al}}{\bar{c}} (1 - \alpha)\delta(T - T_{L,Al}) - \right. \\
& \left. - c' \frac{L_{Si}}{\bar{c}} \delta(T - T_{L,Si})\alpha + \right. \\
& \left. + (1 - c_0) \frac{L_{SiO_2}}{\bar{c}} (1 - \alpha)\delta(T - T_{L,SiO_2}) \right] \frac{dT}{dt} = \\
& = \left[\frac{Q}{\bar{c}} + c_0 \frac{L_{Al}}{\bar{c}} e(T - T_{L,Al}) + c' \frac{L_{Si}}{\bar{c}} e(T - T_{L,Si}) + \right. \\
& \left. + (1 - c_0) \frac{L_{SiO_2}}{\bar{c}} e(T - T_{L,SiO_2}) \right] \frac{d\alpha}{dt} -
\end{aligned}$$

$$-\frac{d\varphi}{dt} + \bar{G}, \quad (14)$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = \bar{s}_{\text{SiO}_2} k_0 \exp(-\{E - \varphi_0 [c_0 e(T - T_{L,\text{Al}}) + (1 - c_0) e(T - T_{L,\text{SiO}_2})]\} / RT), \quad (15)$$

в (14) $\bar{G} = G/\rho\bar{c}$.

Начальные условия имеют вид (8).

Для сравнительно небольших времен механоактивации, применяя разложение в ряд Тейлора в точке $t = 0$, соотношение (1) для SiO_2 можно заменить приближенным равенством

$$\bar{s}_{\text{SiO}_2} \approx \frac{k_{\text{SiO}_2}}{s_{m,\text{SiO}_2}} t. \quad (16)$$

Из (16) следует, что в момент завершения измельчения ($t = t_a$) удельная поверхность тугоплавких частиц оксида кремния равна

$$\bar{s}_{\text{SiO}_2} = \frac{k_{\text{SiO}_2}}{s_{m,\text{SiO}_2}} t_a. \quad (17)$$

В этом случае уравнение (15) принимает вид

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{k_{\text{SiO}_2} k_0}{s_{m,\text{SiO}_2}} t_a \exp(-\{E - \varphi_0 [c_0 e(T - T_{L,\text{Al}}) + (1 - c_0) e(T - T_{L,\text{SiO}_2})]\} / RT). \quad (18)$$

Значения исходных параметров взяты из работ [7, 8]: $c_{\text{Al}}^0 = 930$ Дж/(кг·К), $c_{\text{SiO}_2} = 739.3$ Дж/(кг·К), $L_{\text{Al}} = 3.9 \cdot 10^5$ Дж/кг, $L_{\text{Si}} = 1.8 \cdot 10^6$ Дж/кг, $L_{\text{SiO}_2} = 8.4 \cdot 10^5$, $a_{\text{Si}} = 28.1$, $a_{\text{Al}} = 27$, $a_{\text{O}} = 16$, $T_{L,\text{Al}} = 913$ К, $T_{L,\text{Si}} = 1688$ К, $T_{L,\text{SiO}_2} = 1883$ К. Начальная температура $T_0 = 300$ К.

В [3] приведена экспериментальная термограмма при $t_a = 1$ мин, а также зависимости температуры воспламенения $T_{\text{ign}} < T_{L,\text{Al}}$ и максимальной температуры теплового взрыва T_m от времени механоактивации ($1 \leq t_a \leq 20$ мин) в системе $\text{SiO}_2\text{—Al}$ в условиях постоянной скорости внешнего нагрева \bar{G} . С использованием этих данных в настоящей работе определена скорость внешнего нагрева: $\bar{G} = 0.55$ К/с.

Интегрируя (12) в пренебрежении на стадии теплового взрыва мощностью внешнего источника, получаем соотношение

$$T_m - T_{\text{ign}} \approx \frac{Q'}{\bar{c}} + \frac{\varphi_0(t_a)}{\bar{c}}, \quad (19)$$

где $Q' = Q - c' L_{\text{Si}}$.

Вклад предварительной механоактивации исходных компонентов в тепловой эффект реакции на стадии синтеза оценивался по формуле

$$\frac{\Delta T(t_a) - \Delta T(t_a = 1 \text{ мин})}{\Delta T(t_a = 1 \text{ мин})} = \frac{\varphi_0(t_a) - \varphi_0(t_a = 1 \text{ мин})}{\bar{c} \Delta T(t_a = 1 \text{ мин})}, \quad (20)$$

где $\Delta T(t_a) = T_m(t_a) - T_{\text{ign}}(t_a)$. Проведенный с помощью формулы (20) анализ экспериментальных данных [3] позволил сделать вывод, что вклад механоактивации в тепловой эффект сравнительно невелик и не превышает, даже после 20-минутной механоактивации, значения 44.4 К ($3.6 \cdot 10^4$ Дж/кг), или 4.3 % от его общей величины. Нетрудно оценить, что в этих условиях энергия активации химической реакции за счет механической обработки реагентов снижается незначительно, не больше чем на 1340 Дж/моль.

Поэтому, положив в (14), (15) и (19) $\varphi \approx 0$, из (19) находим $Q' = \bar{c}(T_m - T_{\text{ign}}) = 8.37_{-0.07}^{+0.23} \cdot 10^5$ Дж/кг. Отсюда $Q = Q' + c' L_{\text{Si}} = 8.37 \cdot 10^5 + 6.8 \cdot 10^5 = 1.5 \cdot 10^6$ Дж/кг. Отметим, что расчет теплового эффекта реакции по данным, приведенным в [9], определяет эту величину значением $Q = 1.27 \cdot 10^6$ Дж/кг.

При оценке вклада механообработки в тепловой эффект реакции предполагалось полное химическое превращение. Такое допущение дает максимальную оценку вклада механообработки в общий тепловой эффект реакции.

В точке воспламенения при $T_{\text{ign}} < T_{L,\text{Al}}$ с учетом того, что здесь $\delta(T - T_{L,i}) = 0$ и $e(T - T_{L,i}) = 0$, из условия равенства теплоприходов от внешних и внутренних источников и в пренебрежении тепловыделением от релаксации избыточной энергии имеет место следующее соотношение:

$$\frac{Q}{\bar{c}} \frac{k_{\text{SiO}_2} k_0}{s_{m,\text{SiO}_2}} t_a \exp\left(-\frac{E}{RT_{\text{ign}}}\right) \approx \bar{G}. \quad (21)$$

Прологарифмировав (21), получаем уравнение для прямой в координатах $1/RT_{\text{ign}}$ и $-\ln(\bar{c}\bar{G}/Qt_a)$:

$$-\ln\left(\frac{\bar{c}\bar{G}}{Qt_a}\right) = \frac{E}{RT_{\text{ign}}} - \ln\left(\frac{k_{\text{SiO}_2} k_0}{s_{m,\text{SiO}_2}}\right). \quad (22)$$

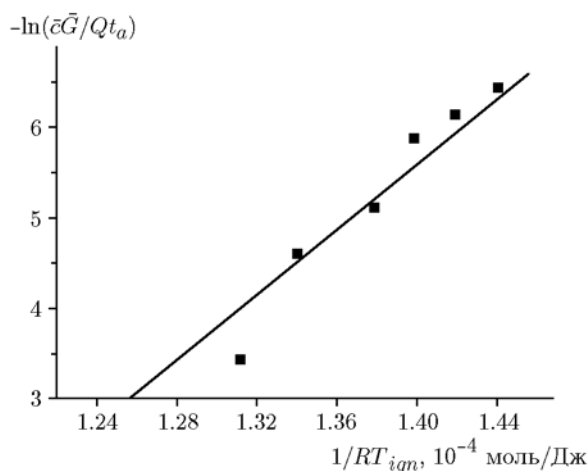


Рис. 1. Результаты обработки в координатах спрямления экспериментальных данных по механохимическому синтезу системы $\text{SiO}_2\text{—Al}$ [3]

На рис. 1 представлены результаты обработки экспериментальных данных [3] в координатах прямой (22). Тангенс угла наклона данной прямой к оси абсцисс определяет энергию активации $E = 227\,464.4$ Дж/моль, а точка ее пересечения с этой осью — параметр $\ln(k_{\text{SiO}_2}k_0/s_{m,\text{SiO}_2}) = 25.57$ или $k_{\text{SiO}_2}k_0/s_{m,\text{SiO}_2} = 3.6 \cdot 10^7$ $1/\text{с}^2$.

Система уравнений (15), (18) с начальным условием (8) и принятыми выше допущениями рассчитывалась по схеме Эйлера 1-го порядка точности. В расчетах использовались полученные выше значения параметров \bar{G} , E ,

$k_{\text{SiO}_2}k_0/s_{m,\text{SiO}_2}$ и Q .

На рис. 2 представлены термограммы теплового взрыва (а) и динамика глубины превращения (б) в зависимости от времени предварительной механоактивации в системе $\text{SiO}_2\text{—Al}$. Как показывает рисунок, нагрев неактивированной смеси осуществляется только за счет внешнего источника энергии (кривая 1), а химическое превращение в ней отсутствует.

Предварительная механоактивация смеси существенно меняет картину химического взаимодействия в системе в условиях ее нагрева внешним источником. В этом случае созданная в результате измельчения исходных компонентов реакционная поверхность при нагреве образца способствует самоускорению химической реакции и реализации теплового взрыва в нем (кривые 2–4). Причем с увеличением времени предварительной механоактивации происходит небольшое снижение температуры воспламенения и максимальной температуры синтеза. Общее время процесса также уменьшается за счет интенсификации химического превращения.

Фазовому переходу на представленных термограммах соответствует изотермическое плато, размер которого уменьшается с увеличением времени механоактивации, так как последнее приводит к росту энергетики смеси.

Зависимость температуры воспламенения смеси $\text{SiO}_2 + \text{Al}$ от времени ее предварительной механоактивации демонстрирует рис. 3. Видно, что с ростом времени механоактивации температура воспламенения снижается. При

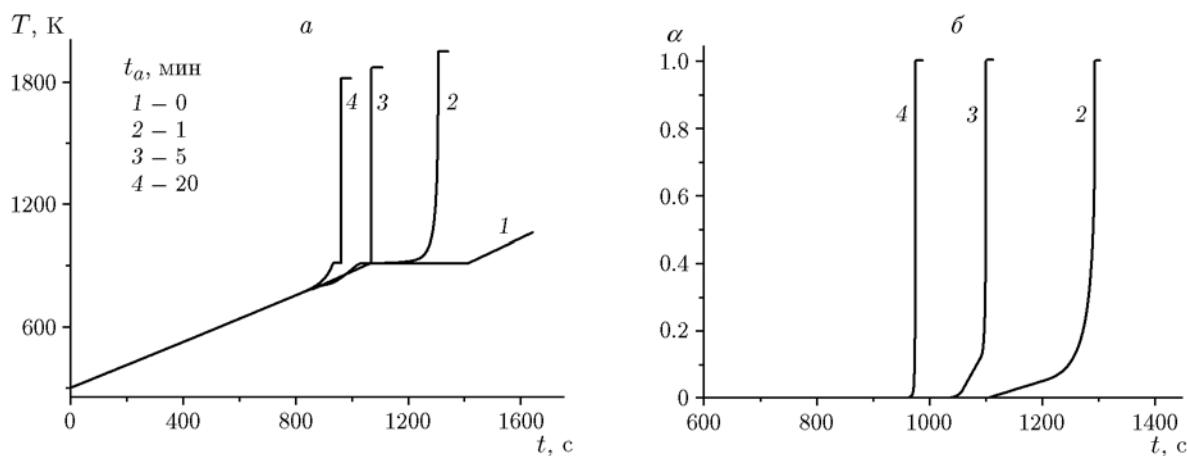


Рис. 2. Динамика температуры (а) и глубины химического превращения (б) в условиях теплового взрыва смеси $\text{SiO}_2 + \text{Al}$ при различных временах предварительной механоактивации исходных компонентов

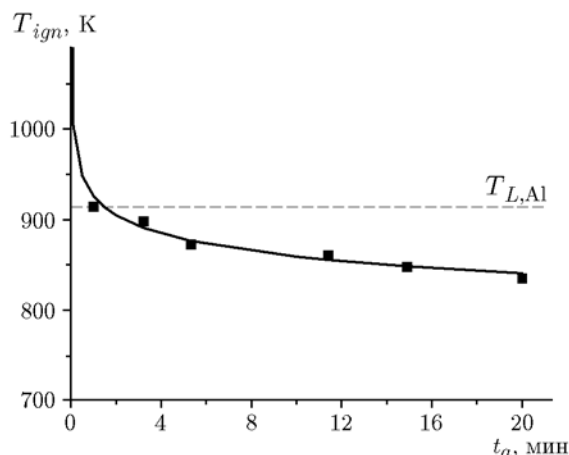


Рис. 3. Зависимость температуры воспламенения смеси $\text{SiO}_2 + \text{Al}$ от времени ее предварительной механоактивации:

сплошная линия — численный расчет, точки — результаты экспериментов [3], пунктирная линия — температура плавления Al

$t_a < 1$ мин воспламенение смеси происходит с участием жидкой фазы, в этом случае $T_{ign} > T_{L,Al}$. При $t_a > 1$ мин инициирование теплового взрыва осуществляется в твердой фазе, до температуры плавления алюминия, что соответствует результатам экспериментов [3].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе макроскопического подхода [1] построена и исследована математическая модель теплового взрыва в предварительно механоактивированной системе $\text{SiO}_2\text{—Al}$, адекватно описывающая основные данные опытов. Показано, что предварительная механоактивация позволяет в режиме теплового взрыва реализовать твердофазное воспламенение порошковой смеси, что соответствует данным экспериментов [3]. С использованием приведенных в [3] экспериментальных данных определены тер-

мокинетические и теплофизические константы, характеризующие процесс механохимического синтеза в этой системе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Смоляков В. К., Лапшин О. В. Макроскопическая кинетика механохимического синтеза. — Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2011.
2. Смоляков В. К., Лапшин О. В. Тепловой взрыв в механоактивированных гетерогенных системах // Физика горения и взрыва. — 2011. — Т. 47, № 3. — С. 74–83.
3. Корчагин М. А., Авакумов Е. Г., Лепезин Г. Г., Винокурова О. Б. Тепловой взрыв и самораспространяющийся высокотемпературный синтез в механически активированных смесях $\text{SiO}_2\text{—Al}$ // Физика горения и взрыва. — 2014. — Т. 50, № 6. — С. 21–27.
4. Ксандопуло Г. И., Мофа Н. Н., Кетегенов Т. А., Червякова О. В., Тюменцева О. А. Горение оксидных систем на основе кварца, модифицированного органическими соединениями при механохимической обработке // Физика горения и взрыва. — 2014. — Т. 38, № 1. — С. 61–67.
5. Кетегенов Т. А., Тюменцева О. А., Байракова О. С., Уракаев Ф. Х. Особенности горения механически активированной системы $\text{SiO}_2\text{—Al}$ // Химия в интересах устойчивого развития. — 2005. — Т. 13. — С. 217–223.
6. Кетегенов Т. А. Макрокинетические параметры горения механоактивированной системы $\text{SiO}_2\text{—Al}$ // Горение и плазмохимия. — 2004. — Т. 2, № 1. — С. 73–80.
7. Физические величины: справочник / А. П. Бабичев, Н. А. Бабушкина, А. М. Братковский и др.; под ред. С. Г. Григорьева, Е. З. Мейлихова. — М.: Энергоатомиздат, 1991.
8. Смитлз К. Дж. Металлы: справочник. — М.: Металлургия, 1980.
9. Верятин У. Д., Маштрёв В. П., Рябцев Н. Г., Тарасов В. И., Рогозкин Б. Д., Коробов И. В. Термодинамические свойства неорганических веществ: справочник / под общей ред. А. П. Зефирова. — М.: Атомиздат, 1965.

Поступила в редакцию 31/III 2015 г.,
в окончательном варианте — 3/VI 2015 г.