

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ
НЕОРГАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

УДК 544.723.2:544.15:[54#386:546(571+591.593)]

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
СОЛЬВАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЗОЛОТА И СЕРЕБРА

© 2020 г. А. К. Койжанова^{a, *, **}, Б. К. Кенжалиев^a, М. Р. Бисенгалиева^b, А. С. Мукушева^c,
Д. Б. Гоголь^b, Н. Н. Абдылдаев^a, Д. Р. Магомедов^a

^aSatbayev University, АО “Институт металлургии и обогащения”,
ул. Шевченко, 29/133, Алматы, 050010 Казахстан

^bИнститут проблем комплексного освоения недр, ул. Инподромная, 5, Караганда, 100000 Казахстан

^cТОО “Тау Кен Консалтинг”, ул. К. Мухамедханова, 37 А, Нур-Султан, 010000 Казахстан

*e-mail: a.koizhanova@satbayev.university

**e-mail: aigul_koizhan@mail.ru

Поступила в редакцию 14.01.2020 г.

После доработки 12.02.2020 г.

Принята к публикации 27.02.2020 г.

Рассмотрены комплексные соединения золота и серебра с цианид-, роданид-, тиосульфат-ионами. Показаны поверхности потенциальной энергии сорбционных комплексов. Проведен расчет комплексных соединений золота и серебра полуэмпирическим квантово-химическим методом РМ6 в составе МОРАС. Для 11 соединений золота получены значения потенциальной энергии при различных сочетаниях. Рассчитаны величины потенциальной энергии для комплексов серебра. В результате уточнены данные о поведении комплексных ионов при сорбции на анионите, наличии энергетических минимумов, путей протекания реакции, о более точных значениях энергии связи или об отсутствии сорбционного взаимодействия в системе. Рассмотрение сорбции комплексных соединений золота и серебра с классических позиций химической кинетики позволило определить порядок энергии активации и природу взаимодействия при протекании процесса. Рассчитаны термодинамические показатели исследованных химических процессов.

Ключевые слова: квантово-химические расчеты, анионит АМ-2Б, комплексные соединения благородных металлов

DOI: 10.31857/S0044457X20070119

ВВЕДЕНИЕ

Золото-серебросодержащие руды коренных месторождений обладают рядом специфических особенностей, существенно отличающих их от руд других цветных металлов и предвещающих особые требования к технологии извлечения металла. Благодаря своей химической устойчивости золото в руде присутствует в самородной (металлической) форме с размером частиц от нескольких миллиметров до тысячных долей миллиметра – “микронники” [1, 2]. Способность металлического золота образовывать значительное количество водорастворимых комплексных соединений, обладающих определенной химической устойчивостью, представлена в работах [3–6], к ним могут быть отнесены гидросульфиды (HS^-), тиосульфаты натрия и аммония ($\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$), тиоцианаты (CNS^-), тиокарбамиды и др. Имеются работы, посвященные изучению линейных двухкоординационных комплексов золота(I) и плоскоквдратных ком-

плексов Au(III), соединений золота с более высокими координационными числами металла [7–10].

В основе металлургических операций, используемых для переработки золото-серебросодержащих руд, лежат окислительно-восстановительные реакции, определяющие изменение химического соединения золота и элементов, входящих в состав рудо- и породообразующих минералов. В растворах, характерных для гидрометаллургических процессов, золото находится в состояниях +1 и +3: $\text{Au}(\text{CN})_2^-$, AuCl_2^- , AuCl_4^- , $\text{Au}[\text{SC}(\text{NH}_2)_2]^{2+}$, $\text{Au}(\text{S}_2\text{O}_3)_2^{3-}$. Эти соединения образуются при растворении золота в цианидных, тиомочевинных, тиосульфатных растворах, а также в растворах галогенидов [11–18].

В нашей предыдущей работе [8] выполнены расчеты комплексных соединений золота и серебра смешанного состава с цианид-, роданид- и тиосульфат-ионами.

Таблица 1. Термодинамические свойства комплексных соединений золота(III) линейной конфигурации

Комплекс	$\Delta H_{\text{обр}}$, кДж/моль		Энергия гидратации, кДж/моль
	газовая фаза	водная среда	
$[\text{Au}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^-$	-1681.55*	-1391.27 [≈]	-290.28
$[\text{Au}(\text{S}_2\text{O}_3)(\text{O}_3\text{S}_2)]^-$	-941.44*	-1151.64*	210.20
$[\text{Au}(\text{O}_3\text{S}_2)_2]^-$	-791.38*	-1059.34*	267.95
$[\text{Au}(\text{CN})(\text{S}_2\text{O}_3)]^0$	145.46*	11.66	133.79
$[\text{Au}(\text{CN})(\text{O}_3\text{S}_2)]^0$	258.13*	-572.23*	830.36
$[\text{Au}(\text{SCN})(\text{S}_2\text{O}_3)]^0$	12.34*	-223.97 [≈]	236.31
$[\text{Au}(\text{SCN})(\text{O}_3\text{S}_2)]^0$	144.55*	37.90*	106.65
$[\text{Au}(\text{NCS})(\text{S}_2\text{O}_3)]^0$	-128.52 [≈]	-570.98 ⁺	442.45
$[\text{Au}(\text{NCS})(\text{O}_3\text{S}_2)]^0$	365.92*	-387.91	753.83

Примечание. * – искажение конфигурации; [≈] – незначительное искажение конфигурации; ⁺ – дополнительная координация центрального атома.

В настоящей работе, являющейся продолжением работы [4], приведены результаты теоретических расчетов для определения вероятности образования данных комплексов, их строения и свойств, сорбционных характеристик и т.д. Рассчитаны энергии образования и гидратации, на основании которых оценена степень устойчивости в водном растворе. Для 9 термодинамически наиболее стабильных комплексов произведены подробные квантово-химические расчеты структурных и реакционных характеристик сорбции на анионите АМ-2Б.

Расчеты комплексных соединений золота и серебра проводили с помощью полуэмпирического метода РМ6, входящего в состав пакета программ МОРАС [19, 20].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Для комплексных соединений золота(III) характерна линейная конфигурация с лигандами. При проведении расчета данных комплексных ионов в свободном состоянии, т.е. в газовой фазе, практически во всех случаях происходило искажение в той или иной степени конфигурации молекулы. При расчете в водной среде деформирование молекулы происходило примерно в половине рассматриваемых случаев, т.е. устойчивость комплексов в водной среде несколько повышается.

Для наиболее устойчивых структур рассчитаны параметры взаимодействия с сорбентом: величины энергии сорбционного взаимодействия,

расстояния до функциональных групп сорбента, наиболее энергетически выгодные варианты ориентации сорбируемых молекул, поверхности потенциальной энергии сорбционных комплексов. На основе полученных данных определены комплексные ионы золота и серебра, способные сорбироваться на анионите, наиболее выгодные параметры и пути протекания процесса сорбции, величины энергий активации и прочих энергетических барьеров в исследуемых системах [9, 10, 21–25].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Расчет термодинамических и структурных характеристик сольватных комплексов Au и Ag с цианид-, роданид- и тиосульфат-ионами

Квантово-химический расчет комплексных соединений Au(III) линейного строения. Квантово-химические расчеты энергий образования и гидратации проводили для 9 комплексных соединений Au(III) линейной конфигурации с лигандами, представленными цианид-, роданид- и тиосульфат-ионами в различных комбинациях. По разности полученных расчетных энергий образования комплексного иона определяли его энергию гидратации. Для ряда комплексных соединений золота(III) с различными лигандами заряд центрального иона равен нулю, т.е. в комплексном соединении отсутствует внешняя сфера с противоионами, что может влиять на устойчивость соединения (табл. 1).

Таким образом, по результатам проведенных расчетов с некоторой степенью допущения можно принять, что для комплексных ионов золота(III) линейной конфигурации наиболее высокую вероятность образования, а следовательно, и наибольшее значение энергии гидратации показывает только соединение $[\text{Au}(\text{NCS})(\text{S}_2\text{O}_3)]$, для которого эта величина составила 442.45 кДж/моль.

Квантово-химический расчет комплексных соединений Ag(I) тетраэдрического строения. Для комплексных соединений серебра(I), помимо линейных комплексов, характерны структуры с тетраэдрической конфигурацией и координационным числом, равным четырем.

При наличии у центрального атома подобных структур четырех различных заместителей возможно возникновение случаев стереоизомерии с зеркальными формами изомеров (право- и левовращающих плоскость поляризации света, если у них имеется оптическая активность).

Для большинства комплексных соединений серебра(I) тетраэдрической конфигурации с рассматриваемыми лигандами при расчетах в газовой фазе происходит значительное искажение геометрии молекулы вплоть до ее разрушения и распада на фрагменты. Устойчивость структуры показали комплексные соединения с цианид- и роданид-ионами, при этом в случае наличия однотипных лигандов в комплексе в водной среде молекула приобретала заметный дипольный момент (рис. 1).

Комплексы с тиосульфат-ионами также показали устойчивость структуры, если при этом не наблюдалось пространственных затруднений (рис. 2).

Расчеты в водной среде показали, что исследуемые соединения имеют высокую устойчивость. Для всех вариантов исследуемых комплексных ионов рассчитанные значения энергии образования в водной среде составили отрицательную величину, при этом их абсолютные значения были сравнительно высокими.

В целом расчетные значения энергии гидратации комплексных соединений серебра с цианид- и роданид-ионами составляют 1300–1500 кДж/моль. При этом при замене цианид-иона на роданид-ион происходит некоторое уменьшение энергии гидратации. Для комплексов, в состав которых входит только роданид-ион, максимальное значение энергии гидратации показывает $[\text{Ag}(\text{SCN})_4]^{3-}$ (1402 кДж/моль). Для соединений с участием тиосульфат-иона устойчивость проявляют комплексы, в состав которых входит только один тиосульфат-лиганд, их энергия гидратации составляет 2200–2600 кДж/моль.

Расчет образования связей термодинамически устойчивых комплексов золота с функциональными группами сорбента. После определения наиболее термодинамически устойчивых структур ком-

плексных соединений золота и серебра с цианид-, роданид- и тиосульфат-лигандами квантово-химическими методами рассчитаны параметры взаимодействия данных соединений с сорбентом. В качестве сорбента рассматривали ионит АМ-2Б. Расчет параметров сорбции заключался в определении энергии и расстояния сорбционного взаимодействия, наиболее выгодных вариантов ориентации сорбируемой молекулы по отношению к сорбенту, построении поверхностей потенциальной энергии и нахождении прочих энергетических характеристик реакции сорбции. Для проведения вычислений подобного рода требовалось определить структуру сорбента, корректно отображающую его реальное строение и наиболее предпочтительную для расчета. Сорбент анионит АМ-2Б представляет собой пространственно-сшитую полимерную композицию с нерегулярным сетчатым каркасом, образованным полистирольными единицами. Для этой композиции проведены расчеты по определению строения и оптимизации структуры методом молекулярной механики ММ2. Полученную в результате вычислений геометрию анионита можно представить, как плоскую двумерную структуру, по обе стороны от которой расположены функциональные группы сорбента (рис. 3).

С учетом подобного строения теоретически можно проводить расчеты для пространственно протяженных объектов с использованием периодических граничных условий, которые при ограниченном наборе атомов позволяют рассчитывать такие сложные структуры, как полимеры. Однако в силу ограничений, имеющихся в программе, использование процедуры COSMO, позволяющей проводить вычисления в водной среде, несовместимо с расчетами протяженных структур. Помимо этого описывающий сорбент кластер, который удовлетворяет периодическим граничным условиям, состоит из более 200 атомов, что увеличивает длительность вычислений.

Вследствие этого расчеты взаимодействия комплексных соединений с сорбентом в водной среде проводили для участка полимерной цепи, включающего две функциональные группы и три стирольные структурные единицы, которые совместно представляют собой участок полимерного каркаса (рис. 4). В местах разрыва полимерной цепи для сохранения условий периодичности были размещены фиктивные атомы, соответствующие закрытым связям. Подобная структура с достаточной степенью точности отображает строение сорбента, и, поскольку насчитывает порядка 100 атомов, позволяет проводить расчеты при умеренных затратах времени.

Расчет заключался в нахождении минимума потенциальной энергии для сорбционной системы сорбент–комплекс благородного металла в

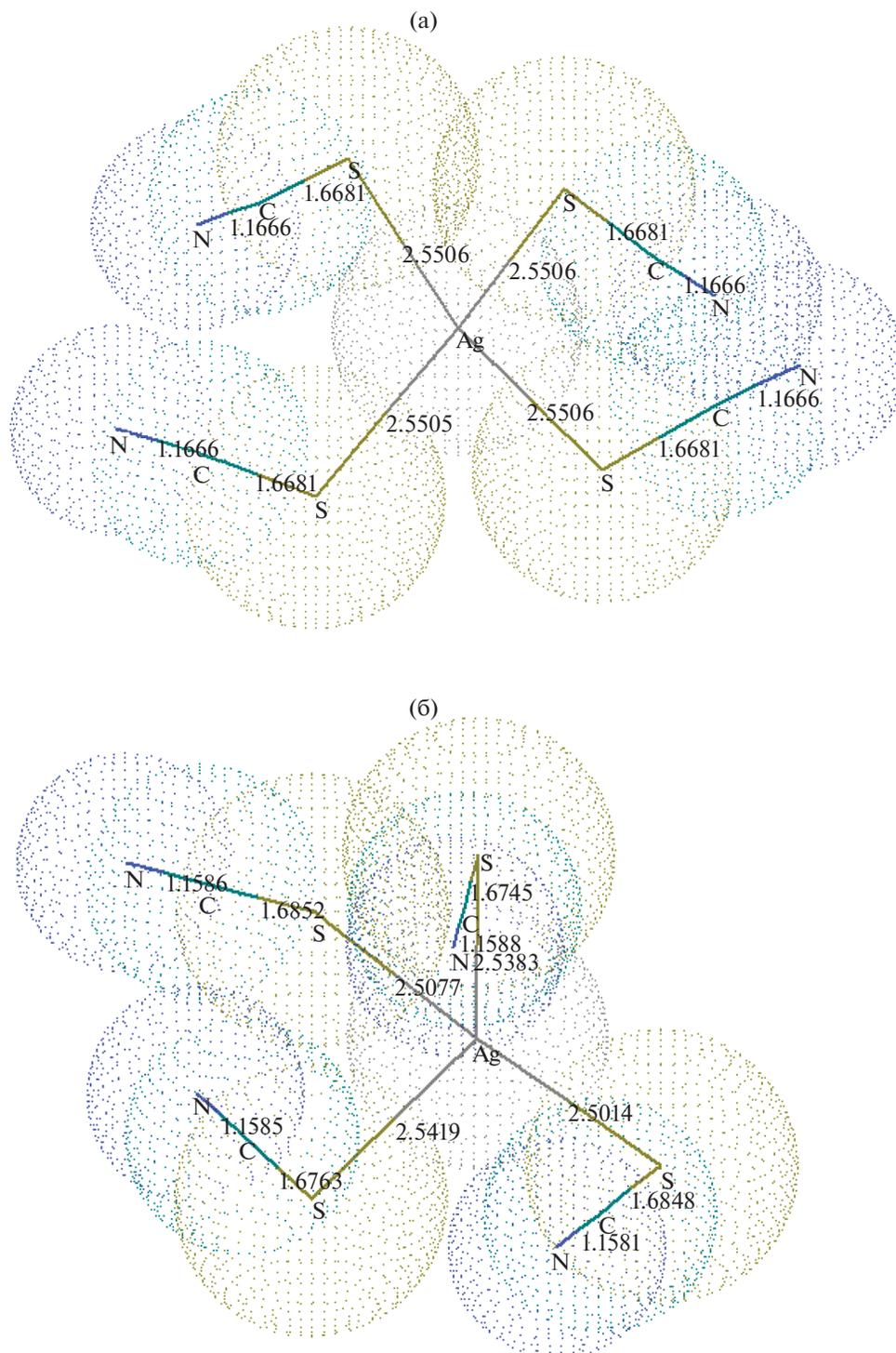


Рис. 1. Длины связей (Å) в комплексном ионе $[\text{Ag}(\text{SCN})_4]^{3-}$: а – структура в газовой фазе; б – структура в водной среде.

зависимости от расстояния между ними. Комплексные соединения размещали таким образом, чтобы их центральный атом находился на продолжении оси связи N–C функциональной груп-

пы сорбента. Исследовали зависимость энергетических характеристик системы только от одного параметра. Так как функциональные группы сорбента представлены третичными и четвертичными

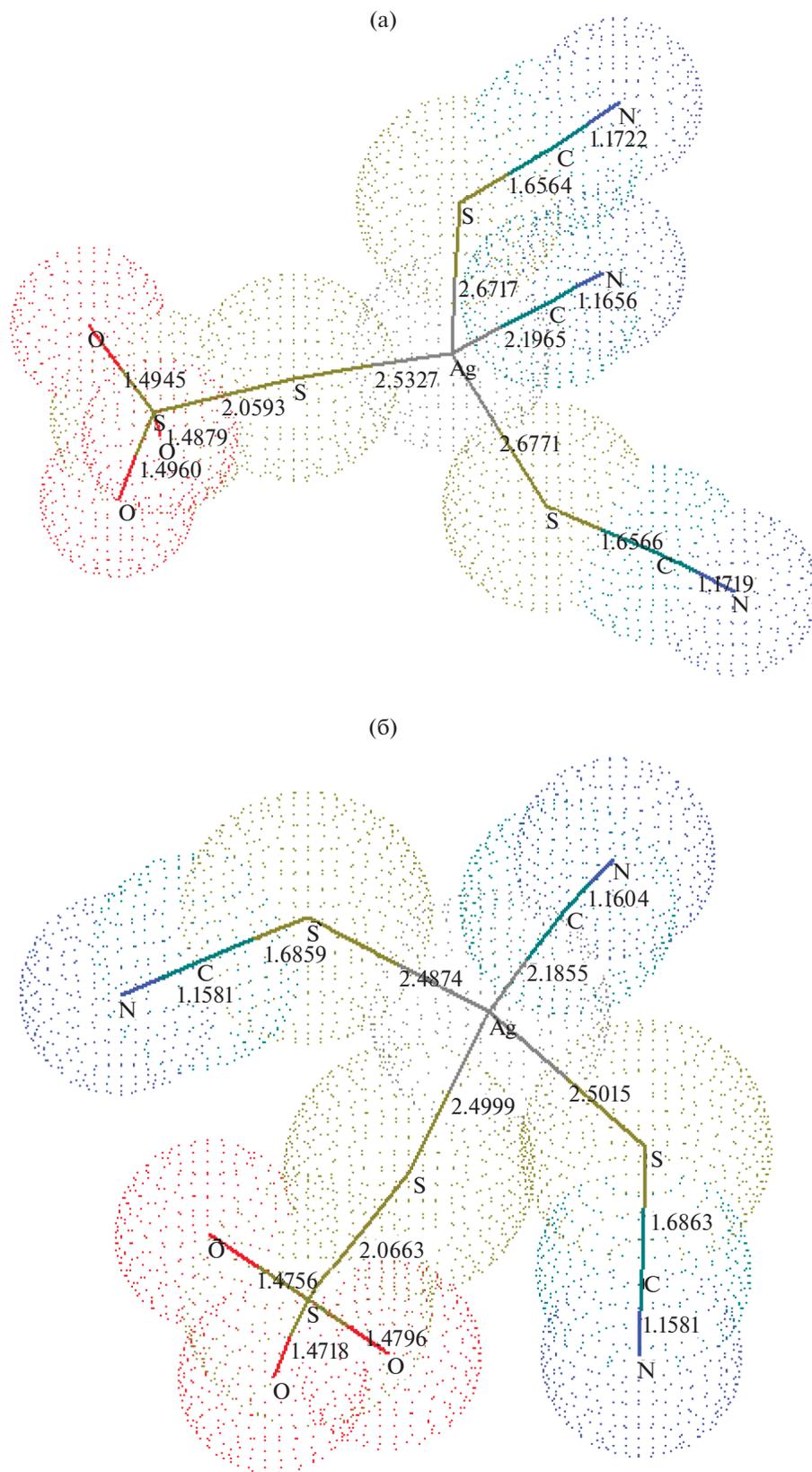


Рис. 2. Длины связей (Å) в комплексном ионе $[\text{Ag}(\text{CN})(\text{SCN})_2(\text{S}_2\text{O}_3)]^{4-}$: а – структура в газовой фазе; б – структура в водной среде.

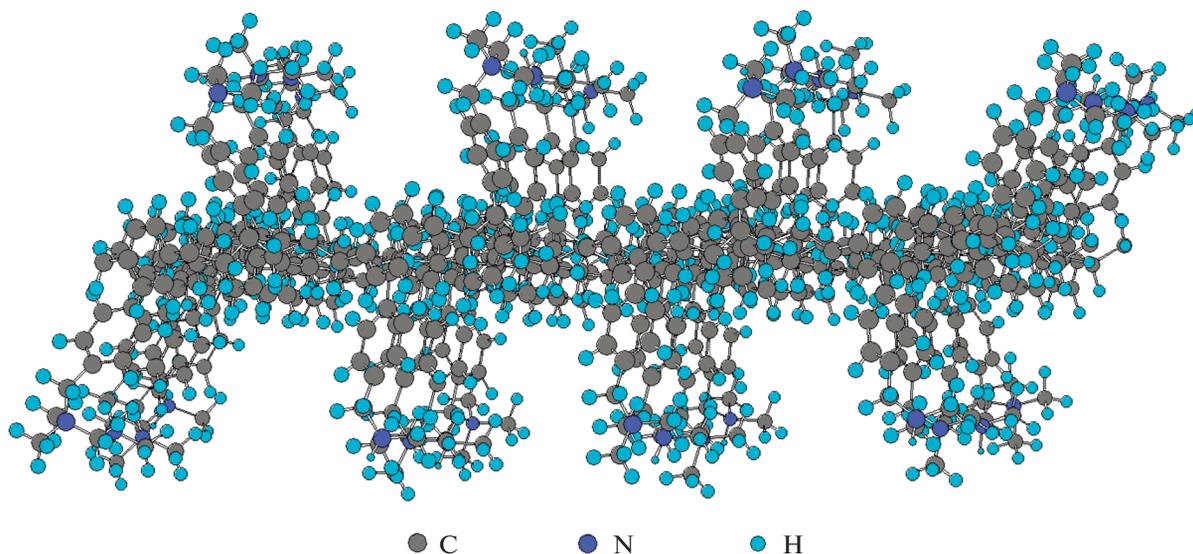


Рис. 3. Фрагмент структуры анионита АМ-2Б.

ми аминогруппами, то для каждого комплексного соединения производили соответственно два типа расчета.

Расчет структурных характеристик образующихся комплексов золота и серебра с сорбентом. Вычисления наиболее выгодной ориентации комплексных соединений золота и серебра отно-

сительно функциональных групп при сорбции на ионите АМ-2Б проводили полуэмпирическим методом квантово-химического расчета PM6 в составе MOPAC.

В процессе адсорбции сорбируемые комплексы могут закрепляться на поверхности сорбента не только через атом металла, но и (преимущественно) за счет взаимодействия с лигандами комплекса. Для определения оптимальных вариантов ориентации соединений при сорбции комплексных ионов золота и серебра на анионите проводили квантово-химический расчет потенциальной энергии сорбционных комплексов при варьировании пространственного расположения молекул. Комплексные ионы золота и серебра в зависимости от их размеров располагались на расстоянии 5.0–6.5 Å от атома азота функциональной группы сорбента. Различная ориентация комплекса относительно этого атома производилась путем изменения величины двух торсионных углов, определяющих взаимное расположение комплексного иона и сорбента. При этом молекула комплексного соединения вращалась относительно функциональной группы сорбента на 360° в продольной и поперечной плоскостях. Шаги изменения значений торсионных углов составляли 22.5° и 30°, количество значений для расчета — 9 и 12 соответственно. Таким образом, минимум потенциальной энергии для каждой сорбционной системы выбирали из 108 вариантов конфигурационного взаимодействия как для золота, так и для серебра.

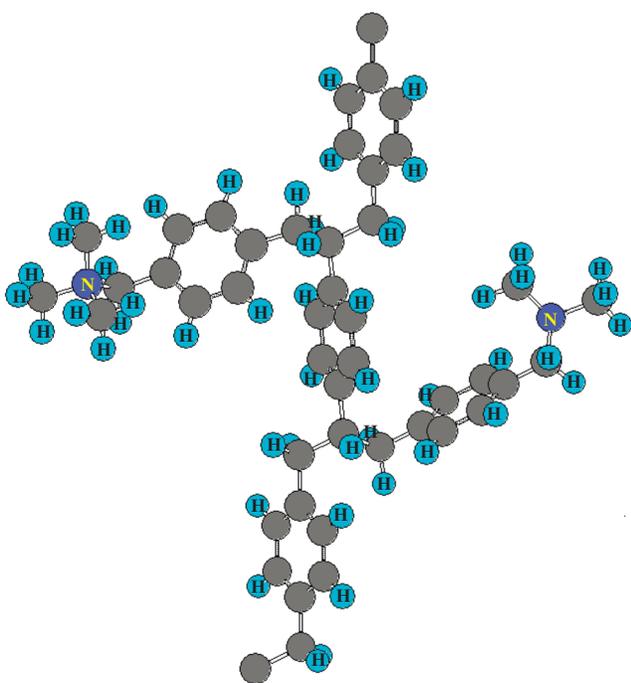


Рис. 4. Участок структуры анионита АМ-2Б. По вертикали изображен полистирольный каркас, слева от него — четвертичная функциональная аминогруппа, справа — третичная аминогруппа.

Таблица 2. Потенциальная энергия сорбционных комплексов золота при наиболее выгодной конфигурации, ккал/моль

Комплекс	Аминогруппа	
	третичная	четвертичная
$[\text{Au}(\text{CN})(\text{SCN})]^-$	4016.84	4042.64
$[\text{Au}(\text{CN})(\text{S}_2\text{O}_3)]^{2-}$	3728.12	3911.42
$[\text{Au}(\text{CN})_3(\text{SCN})]^-$	4122.02	4150.30
$[\text{Au}(\text{CN})_2(\text{SCN})_2]^-$ (<i>транс</i>)	4096.98	4114.20
$[\text{Au}(\text{CN})(\text{SCN})_3]^-$	4080.76	4114.67
$[\text{Au}(\text{CN})_3(\text{S}_2\text{O}_3)]^{2-}$	4004.46	4049.25
$[\text{Au}(\text{CN})_2(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$ (<i>транс</i>)	3923.09	3962.64
$[\text{Au}(\text{CN})(\text{S}_2\text{O}_3)_3]^{4-}$	3558.25	3788.32
$[\text{Au}(\text{CN})_2(\text{SCN})(\text{S}_2\text{O}_3)]^{2-}$ (<i>транс</i>)	3986.68	4056.10
$[\text{Au}(\text{CN})(\text{SCN})_2(\text{S}_2\text{O}_3)]^{2-}$ (<i>транс</i>)	3960.88	4004.59
$[\text{Au}(\text{CN})(\text{SCN})(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$ (<i>цис</i>)	3877.37	3916.79

третичных и четвертичных функциональных группах сорбента. Из этих наборов определяли наиболее выгодную конфигурацию сорбционного комплекса, соответствующую минимальному значению потенциальной энергии. Значения ми-

нимумов энергии для сорбционных систем с участием комплексов золота приведены в табл. 2, серебра – табл. 3.

Таблица 3. Потенциальная энергия сорбционных комплексов серебра при наиболее выгодной конфигурации, ккал/моль

Комплекс	Аминогруппа	
	третичная	четвертичная
$[\text{Ag}(\text{CN})(\text{SCN})]^-$	2686.08	4013.81
$[\text{Ag}(\text{CN})(\text{S}_2\text{O}_3)]^{2-}$	954.77	756.08
$[\text{Ag}(\text{CN})(\text{SCN})_3]^{3-}$	4122.87	3651.77
$[\text{Ag}(\text{CN})(\text{SCN})_2(\text{S}_2\text{O}_3)]^{4-}$	2576.15	2570.91

Рассчитанные конфигурации сорбционных комплексов золота и серебра на анионите АМ-2Б показывают, что рассматриваемые соединения проявляют склонность к координации на функциональной группе сорбента не только по центральному атому, но и по атомам лиганда. Такими атомами являются атом азота в случае цианидной группы, атомы серы для роданид- и тиосульфат-групп, и в некоторых случаях атомы кислорода тиосульфат-групп (рис. 5, 6, 7а). При этом отмечено, что в случае сорбции на третичной функциональной аминогруппе сорбента связывание комплексного иона золота в основном происходит по метильным группам, а не по атому водорода при атоме азота. В некоторых случаях характерно значительное уменьшение значения потенциальной энергии образующегося сорбционного комплекса серебра за счет образования водородных связей между метильными атомами водорода

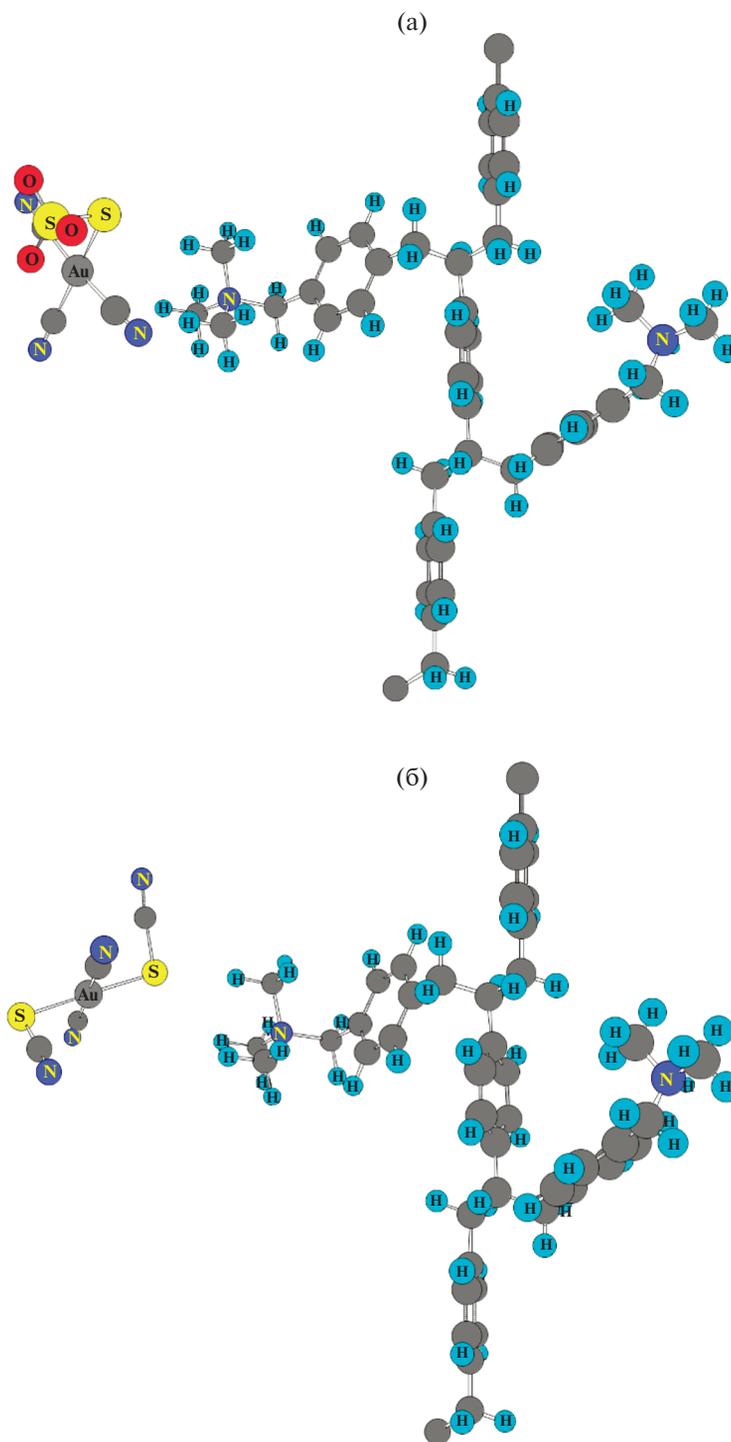


Рис. 5. Энергетически выгодная ориентация комплексного иона $[\text{Au}(\text{CN})_3(\text{S}_2\text{O}_3)]^{2-}$ (а) и $[\text{Au}(\text{CN})_2(\text{SCN})_2]^-$ (б) при сорбции на четвертичной аминогруппе сорбента.

аминогруппы и атомами кислорода тиосульфатных лигандов либо атомами серы роданидных групп (рис. 7б).

В случае комплексного соединения $\text{Ag}(\text{CN})(\text{S}_2\text{O}_3)^{2-}$ отмечено образование сразу двух водородных связей по двум атомам кислорода

тиосульфатной группы и по двум атомам водорода метильных групп четвертичной аминогруппы (рис. 8), что сказывается на устойчивости сорбционной системы и прочности образующихся связей.

По результатам расчета можно сделать вывод, что сорбционные комплексы соединений серебра

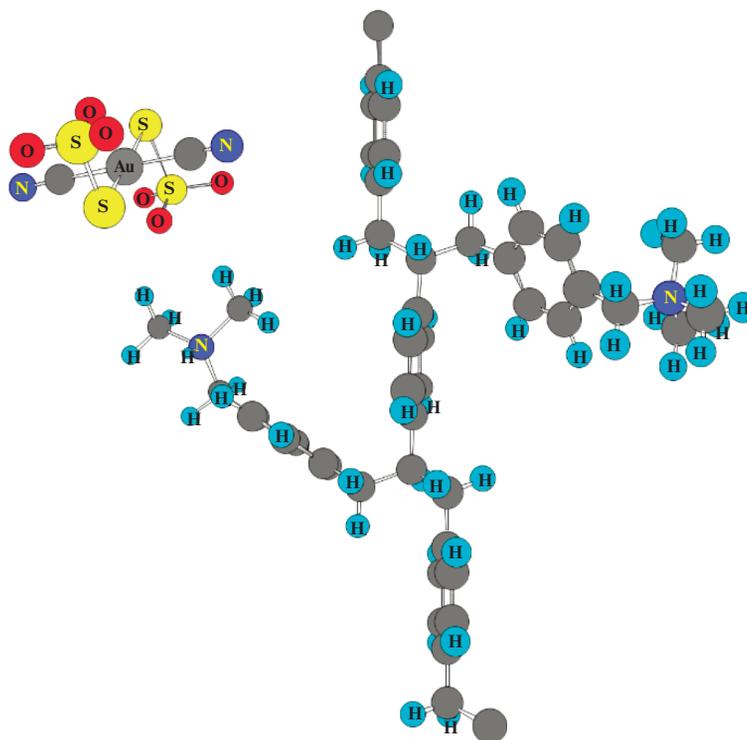


Рис. 6. Энергетически выгодная ориентация комплексного иона $[\text{Au}(\text{CN})_2(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$ при сорбции на третичной функциональной группе сорбента.

показывают большую устойчивость по сравнению с комплексами с участием золота.

Полученные в результате вычислений оптимальные конфигурации комплексных систем использовали для расчета поверхностей потенциальной энергии реакции сорбции соединений золота на анионите АМ-2Б.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате квантово-химических расчетов комплексных соединений золота и серебра с лигандами — цианид-, роданид- и тиосульфат-ионами — исследован ряд возможных структур изучаемых комплексов. Для большинства рассмотренных комплексных соединений теоретические исследования указанных характеристик выполнены впервые с применением полуэмпирического метода квантово-химического расчета РМ6, а также процедуры проведения вычислений в водной среде COSMO, входящих в пакет программ МОРАС.

Среди вычисленных характеристик получены данные о строении комплексов и информация об их термодинамических свойствах: теплоте образования в газовой фазе и водной среде, энергии

гидратации и термодинамической стабильности образующихся комплексных соединений золота.

Для данных структур рассчитаны энергетические параметры взаимодействия с анионитом АМ-2Б (с учетом наличия в его составе третичных и четвертичных функциональных аминных групп). По энергетическим профилям сорбционных систем определены соединения, подвергающиеся сорбции на рассматриваемом сорбенте. Для них вычислены энергетически наиболее выгодные варианты ориентации и способы подхода при сорбции, определены дистанции, на которых происходит сорбция, вычислены значения энергии образующихся при этом связей, величины которых хорошо согласуются с теорией. Установлено, что в образовании сорбционного связывания на анионите принимают участие как центральный атом металла, так и атомы азота, кислорода и серы, лигандов комплексного соединения, в том числе за счет образования водородных связей.

Для более подробного изучения путей протекания реакции сорбции и энергетических характеристик рассматриваемых систем исследованы поверхности потенциальной энергии сорбционных комплексов. В результате получены уточненные данные о поведении комплексных ионов при сорбции на анионите, наличии энергетических

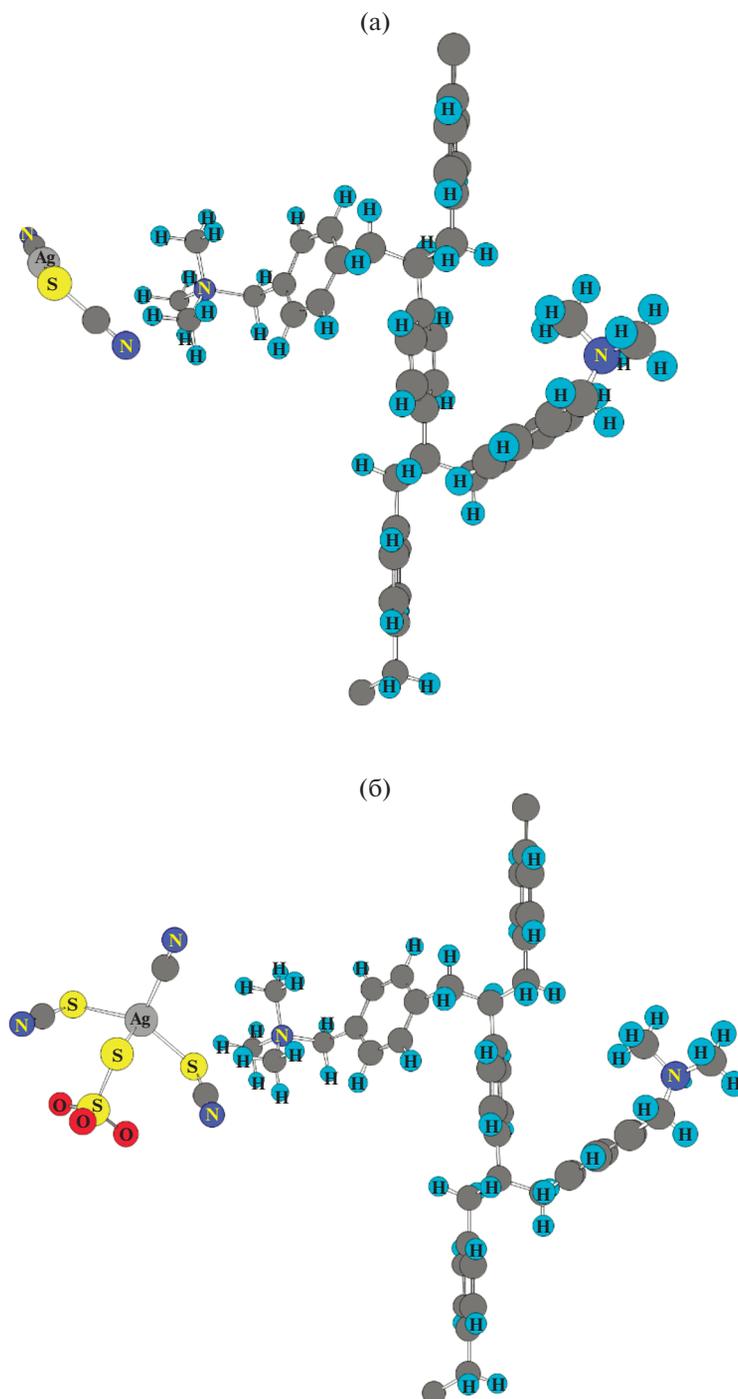


Рис. 7. Энергетически выгодная ориентация комплексного иона $[\text{Ag}(\text{CN})(\text{SCN})]^-$ (а) и $[\text{Ag}(\text{CN})(\text{SCN})_2(\text{S}_2\text{O}_3)]^{4-}$ (б) при сорбции на четвертичной аминогруппе сорбента.

минимумов, путях протекания реакции, о значениях энергии связи или об отсутствии сорбционного взаимодействия в системе. Рассмотрение сорбции комплексных соединений золота и се-

ребра с классических позиций химической кинетики позволило определить порядок энергии активации и природу взаимодействия при протекании процесса. Низкая емкость анионитов по

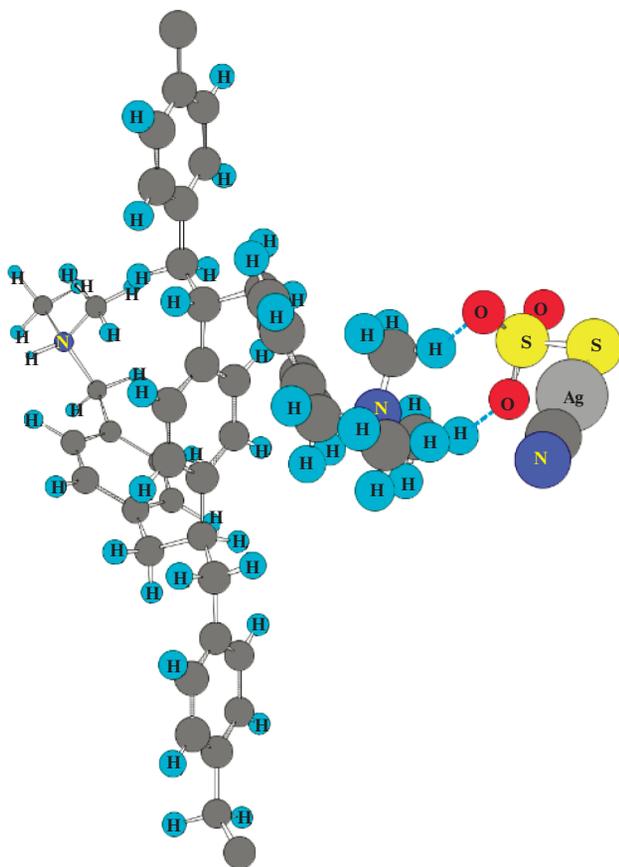


Рис. 8. Энергетически выгодная ориентация комплекса $[\text{Ag}(\text{CN})(\text{S}_2\text{O}_3)]^{2-}$ при сорбции на четвертичной группе с образованием двух водородных связей.

серебру в цианид-тиосульфатных растворах, вероятно, связана с образованием цианид-роданидных комплексов, слабо сорбирующихся ионитом, или вытеснением сорбированного цианидного комплекса серебра роданид-ионом.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках грантового и программно-целевого финансирования МОН РК (№ AP05130143 и № BR05236406).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бегалинов А.Б., Медеуов Ч.К., Абдуллаев О.Т. // Горный журн. 2008. № 3. С. 50.
2. Котляр Ю.А., Меретуков М.А., Стрижко Л.С. // Металлургия благородных металлов. М.: ИД "Руда и Металлы", 2005. 432 с.
3. Кальный Д.Б., Коковкин В.В., Миронов И.В. // Журн. общей химии. 2011. Т. 81. № 5. С. 705. [Kal'nyi D.B., Kokovkin V.V., Mironov I.V. // Russ. J. Gen. Chem. 2011. V. 81. № 5. P. 793.]
4. Bekturganov N.S., Gogol' D.B., Bisengaliyeva M.R. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2014. V. 59. № 4. P. 337. [Бектурганов Н.С., Гоголь Д.Б., Бисенгалиева М.Р. и др. // Журн. неорганической химии. 2014. Т. 59. № 4. С. 492.] <https://doi.org/10.1134/S0036023614040032>
5. Ерденова М.Б., Койжанова А.К., Камалов Э.М. и др. // Комплексное использование минерального сырья. 2018. № 2. С. 12. <https://doi.org/10.31643/2018/6445.2>
6. Пономарева Е.И., Бисенгалиева М.Р., Мукушева А.С. и др. // Докл. НАН РК. 2012. № 2. С. 39.
7. Senanayake G. // Miner. Eng. 2004. V. 17. № 6. P. 785.
8. Grose A.C., Dicoski G.W., Shaw M.J., Haddad P.R. // Hydrometallurgy. 2003. V. 69. P. 1. [https://doi.org/10.1016/S0304-386X\(02\)00169-X](https://doi.org/10.1016/S0304-386X(02)00169-X)
9. De Marco D., Linert W. // J. Chem. Thermodyn. 2002. V. 34. № 8. P. 1137.
10. De Marco D. // Thermochim. Acta. 1991. V. 178. № 12. P. 203. [https://doi.org/10.1016/0040-6031\(91\)80311-6](https://doi.org/10.1016/0040-6031(91)80311-6)
11. Popovetskiy P.S., Bulavchenko A.I., Demidova M.G., Podlipskaya T.Yu. // J. Struct. Chem. 2015. V. 56. P. 357. [Поповецкий П.С., Булавченко А.И., Демидова М.Г., Подлипская Т.Ю. // Журн. структур. химии. 2015. Т. 56. С. 372.] <https://doi.org/10.1134/S0022476615020225>
12. Kogan V.S., Berkovich I.V. // Complex Use of Mineral Resources. 2019. № 4. P. 38. <https://doi.org/10.31643/2019/6445.36>
13. Krinitsyn D.O., Kononova O.N., Krylov A.S. et al. // Russ. J. Phys. Chem. 2008. V. 82. № 3. P. 429. [Криницын Д.О., Коконова О.Н., Крылов А.С. и др. // Журн. физ. химии. 2008. Т. 82. № 3. С. 429.] <https://doi.org/10.1134/S0036024408030199>
14. Stewart J.J.P. // J. Mol. Mod. 2007. V. 13. P. 1173. <https://doi.org/10.1007/s00894-007-0233-4>
15. Bisengaliyeva M.R., Zhakupov R.M., Knyazev A.V. et al. // J. Chem. Eng. Data. 2019. V. 64. № 12. P. 5398. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.9b00596>
16. Teplukhin A.V. // J. Struct. Chem. 2019. V. 60. № 10. P. 1590. [Теплухин А.В. // Журн. структур. химии. 2019. Т. 60. № 10. С. 1590.] <https://doi.org/10.1134/S0022476619100044>
17. Huerta-Marcial S.T., Figueroa-Ochoa E.B., Rosales-Rivera L.C. et al. // J. Mol. Liq. 2017. V. 246. P. 197. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2017.09.068>
18. Horovitz O., Pasca R-D. // Studia UBB Chemia. 2017. V. 62. № 2. P. 19. <https://doi.org/10.24193/subbchem.2017.2.02>
19. Kuznetsov V.S., Usol'tseva N.V., Blinov A.P. et al. // J. Struct. Chem. 2016. V. 57. № 8. P. 1577. [Кузнецов В.С., Усольцева Н.В., Блинов А.П. и др. // Журн. структур. химии. 2016. Т. 57. № 8. P. 1577.] <https://doi.org/10.1134/S0022476616080126>
20. Titova A.G., Krest'yaninov M.A., Zaichikov A.M. // J. Struct. Chem. 2015. V. 56. № 1. P. 58. [Титова А.Г., Крестьянинов М.А., Зайчиков А.М. // Журн. струк-

- тур. химии. 2015. Т. 56. № 1. С. 58].
<https://doi.org/10.1134/S0022476615010096>
21. *Yarzhemskiy V.G., D'yakov Yu.A., Izotov A.D., Izotova V.O.* // Russ. J. Inorg. Chem. 2019. V. 64. № 10. P. 1057. [*Яржемский В.Г., Дьяков Ю.А., Изотов А.Д., Изотова В.О.* // Журн. неорганической химии. 2019. Т. 64. № 10. С. 1057].
<https://doi.org/10.1134/S0044457X19100180>
22. *Yarzhemskiy V.G., Izotova V.O., Kazaryan M.A. et al.* // Russ. J. Inorg. Chem. 2017. V. 62. № 1. P. 72. [*Яржемский В.Г., Изотова В.О., Казарян М.А. и др.* // Журн. неорганической химии. 2017. Т. 62. № 1. С. 72.]
<https://doi.org/10.1134/S0036023617010235>
23. *Bessonov A.A., Baidina I.A., Morozova N.B. et al.* // J. Struct. Chem. 2007. V. 48. P. 282. [*Бессонов А.А., Байдина И.А., Морозова Н.Б. и др.* // Журн. структурной химии. 2007. Т. 48. С. 282].
<https://doi.org/10.1007/s10947-007-0044-6>
24. <http://OpenMORAS.net>
25. *Абдылдаев Н.Н., Койжанова А.К., Камалов Э.М. и др.* // Комплексное использование минерального сырья. 2018. № 4. С. 11.
<https://doi.org/10.31643/2018/6445.25>