

Nátrium-, kálium-halogenid sókeverék alacsony olvadáspontú összetételeinek keresése

Searching for low-melting compositions of sodium-, potassium-halide salt mixture

Baranyai Viktor Zsolt^a, T. Szabó József^b, Kaptay György^c

^aBay Zoltán Alkalmazott Kutási Közhasznú Nonprofit Kft., tudományos munkatárs, viktor.baranyai@bayzoltan.hu

^bBay Zoltán Alkalmazott Kutási Közhasznú Nonprofit Kft., tudományos munkatárs, jozsef.szabo@bayzoltan.hu

^cBay Zoltán Alkalmazott Kutási Közhasznú Nonprofit Kft., vezető kutató, gyorgy.kaptay@bayzoltan.hu

Miskolci Egyetem, Nanotechnológiai Intézeti Kihelyezett Tanszék, egyetemi tanár

ELKH-ME Anyagtudományi Kutatócsoport, kutatócsoport vezető

Kulcsszavak

sóolvadékok, alkáli-halogenidok, olvadáspont, számítógépes termodinamika, fázisegyensúly

Keywords

molten salts, alkali halides, melting point, computational thermodynamics, phase equilibrium

Absztrakt

A sóolvadékok kiemelt szerepet töltenek be az ionos folyadékok között, lévén hogy számos elektrokémiai eljárás fontos elemei. Ezen technológiák gazdaságos megvalósíthatóságához olcsó és alacsony olvadáspontú összetételeket kell keresni.

Jelen kutatás során többkomponensű, Na⁺ és K⁺ kationokból, valamint F⁻, Cl⁻, Br⁻ és I⁻ anionokból álló sókeverékeket vizsgáltunk a FactSage szoftvert és sóolvadék adatbankjait felhasználva. A lehetséges összetétel-kombinációkat kis lépésközökkel végigszámolva lehetőségünk nyílt kiválasztani az elektrokémiai felhasználásra potenciálisan alkalmas, alacsony olvadáspontú összetételeket.

Abstract

Molten salts have an important role among ionic liquids, as they are essential components of many electrochemical processes. In order to make these technologies economically viable, cheap and low-melting compositions must be sought.

In this research multi-component salt mixtures consisting of Na⁺ and K⁺ cations and F⁻, Cl⁻, Br⁻ and I⁻ anions were examined using the FactSage software and molten salt data banks. By scanning all the possible composition combinations in small steps, we had the opportunity to select compositions with a low melting point that are potentially suitable for electrochemical use.

Bevezetés

A sóolvadékok számos technológiában kiemelt szerepet töltenek be. Sóolvadékokat használhatnak acélgépjárműknél, alumínium hulladék feldolgozásánál, nukleáris reaktorok hűtőközegeként, vagy éppen hőtároló közegként [1-8]. Elektrokémiai felhasználások, ezen belül fémolvadék akkumulátorok terén is egyre nagyobb figyelem összpontosul a sóolvadékokra, mint lehetséges elektrolitokra [9-12]. Kim és társai öt kritériumot állítottak a potenciális elektrolitokkal szemben: alacsony olvadáspont, nagy ionos vezetőképesség, megfelelő sűrűség, spontán és visszafordíthatatlan elektród-elektrolit reakciók hiánya és minimális fém oldhatóság. Az utóbbi kritériumról megjegyzendő, hogy az önkisülés következtében fellépő veszteség csökkentése végett nagy jelentősége van. Megállapították, hogy a fémek oldhatósága csökken a sóolvadék elektrolitban további kationok hozzáadásával [9]. Az alumínium ipari előállításánál sóolvadék elektrolízissel történik, általánosan kriolitot használnak [13], ugyanakkor léteznek megoldások kloridos olvadékból történő elektrolízisre is [14-15]. Sóolvadék elektrolízissel leválasztható titán [16], előállíthatók fémoxidok [17-19], szilicidok [20], karbon nanocsövek [21-24]. A szemcsékkel erősített fémmátrixú kompozitok újrahasznosításának lényeges kérdése a mátrix és a szemcsék szétválasztása, ami sóolvadék alkalmazásával megoldható [25]. Sóolvadékok alkalmasak lehetnek fémek és kerámiák felületkezelésére [26], fémmátrixú és karbonmátrixú kompozitok előállítására [27-32].

A sóolvadékok fizikai-kémiai jellemzőit számos kutató igyekezett számítógéppel modellezni. Arago és társai három különböző erőtér modell (Tosi-Fumi, Smith-Dang és Joung-Cheatham) figyelembevételével és három eltérő számítási módszerrel számították ki alkáli-halogenid keverékének olvadáspontját [33]. Megállapították, hogy NaCl esetén a Tosi-Fumi modellel kapott olvadáspont

érték áll a legközelebb a kísérleti eredményekhez.

Waltz és társai a WBK erőtér modell bevezetésével jobb közelítést kaptak alkáli-halogenidok fizikai jellemzőinek (köztük az olvadáspont) meghatározására, mint a korábban alkalmazott modellekkel lehetett [34-35].

Alkáli halogenidok olvadási jellemzőit meghatározza az anion-kation összetétel, mivel az ionok közti kötés erősségét befolyásolja az ionok közötti távolság, ezért nagyobb rendszámú (és nagyobb méretű) ionok között a kötés erőssége kisebb. Ebből kifolyólag általában elmondható, hogy akár a kationok, akár az anionok esetén a rendszám növelése kisebb olvadáspontot eredményez tiszta (egyfajta aniont és kationt tartalmazó) sók esetén [36-37]. Az ionméret növelésével nem csak az olvadáspont, de a hővezető-képesség [38] és a hőkapacitás [39] is csökken. Keverékek olvadáspontja meghatározható számítógépes termodinamika (computational thermodynamics) módszerével is, amihez számos kereskedelemben kapható szoftvercsomag rendelkezésre áll. Ezen szoftverek termodinamikai adatbázisokra és a vonatkozó egyenletekre támaszkodva határozzák meg a lehetséges fázisok egyensúlyát, figyelembe véve a rendszer Gibbs-energia minimumra való törekvését [6, 40-42].

Jelen munkánk során FactSage szoftvercsomagot felhasználva határoztuk meg Na⁺, K⁺ kationokat, illetve F⁻, Cl⁻, Br⁻, I⁻ anionokat tartalmazó sókeverékek legalacsonyabb olvadáspontú összetételeit.

1. A kutatás során alkalmazott módszerek

Munkánkhoz FactSage 8.1 szoftvercsomagot használtuk, annak fázisegyensúly meghatározására szolgáló Equilib modulját, illetve az FTSalt és ELEM adatbázisokat.

A FactSage lehetővé teszi ismétlődő feladatok elvégzésére saját programkód, úgynevezett makró fejlesztését. Erre a célra írt makrókat lefuttatva nagy koncentráció felbontással (5 mol% az anionok és kationok esetén is)

végigpásztáztuk az összes lehetséges összetétel-kombinációt, és kiválasztottuk azokat az összetételeket, amelyek alacsony olvadáspontjuk révén gazdaságosan alkalmazhatók lehetnek elektrolitként.

A valóságos technológiáknál az elektrolit összetétele időben változhat, illetve a cellán belül térben is eltérhet az előre beállított összetételtől. Ezért megvizsgáltuk azt is, hogy a kiválasztott összetételű sókeverékek olvadáspontja mennyire érzékeny az egyes ionok koncentrációjának változására.

2. Kétkomponensű alkáli-halogenid rendszerek

Kétkomponensű (valójában kvázi kétkomponensű) rendszereket vizsgálva megállapíthatjuk, hogy a sókeverékek olvadáspontja kisebb, mint a tiszta sóké. Ez elmondható mind az ugyanazon aniont és két eltérő kationt (1. táblázat), illetve ugyanazon kationt és két eltérő aniont (2. táblázat) tartalmazó rendszerekről is.

1. táblázat: A talált minimum olvadáspontok (T_m (min)) a hozzájuk tartozó kationösszetétellel a $NaX-KX$ kvázibinér rendszerekben a különböző halogenid ionok ($X: F^-, Cl^-, Br^-, I^-$) estén

Anion	Összetétel ($Na^+/(Na^++K^+)$) [mol/mol]	T_m (min) [°C]
F^-	0,397	718
Cl^-	0,506	657
Br^-	0,487	643
I^-	0,588	580

2. táblázat: A talált minimum olvadáspontok (T_m (min)) a hozzájuk tartozó anionösszetétellel az $X_2/(X_1+X_2)$ kvázibinér rendszerekben a vizsgált két kation (K^+, Na^+) estén

Kation	Anion1 (X_1)	Anion2 (X_2)	Összetétel $X_2/(X_1+X_2)$ [mol/mol]	T_m [°C]
K^+	Br^-	Cl^-	0,35	717
		F^-	0,405	581
		I^-	0,67	663
	Cl^-	F^-	0,45	606
		I^-	0,601	599
		F^-	0,602	543
Na^+	Br^-	Cl^-	0,25	740
		F^-	0,328	642
		I^-	0,687	645
	Cl^-	F^-	0,33	679
		I^-	0,6	573
		F^-	0,815	596

Az 1. táblázatot elemezve megállapíthatjuk, hogy a minimális olvadáspontokhoz tartozó összetételek 0,4-0,6 móltört tartományon belül vannak. Az anion méretét növelve csökken az olvadáspont. A 2. táblázatból látható, hogy az olvadáspont minimumhoz tartozó összetételek szélesebb összetétel-tartományon belül helyezkednek el. Ezeknél az összetételeknél általánosan elmondható, hogy a nagyobb rádiuszú kation aránya nagyobb. Azt feltételeznénk a tiszta sók olvadáspontjait elemezve, hogy a nagy anionokat

($NaBr-NaI$, $KBr-KI$) tartalmazó keverékek eredményezik a legkisebb minimum olvadáspontot. Ezzel szemben kisebb és nagyobb anionokat ($KF-KI$, illetve $NaCl-NaI$) tartalmazó keverékek minimum olvadáspontja 75-100 °C-al kisebb.

3. A kapott eredmények és kiértékelésük

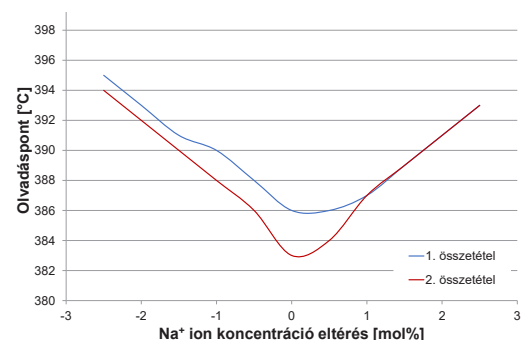
A vizsgálataink során megállapítottuk, hogy az elérhető legalacsonyabb olvadáspont értékek 380-390 °C között alakulnak. Valamennyi 400 °C alatti olvadáspontú összetételről elmondható, hogy a kationok aránya: 35-65 mol% Na^+ , 35-65 mol% K^+ ; az anionok aránya: 10-20 mol% Cl^- , 0 mol% F^- , 25-45 mol% Br^- , 35-65 mol% I^- (utóbbi kettő együtt 80-90 mol%). A két legalacsonyabb olvadáspontot eredményező, egymástól markánsan eltérő összetételt, valamint a hozzájuk tartozó olvadáspontokat a 3. táblázatban mutatjuk be. Az eredmények összhangban vannak a korábbi szakaszban bemutatottakkal, a legalacsonyabb olvadáspontokat azok az összetételek adják, ahol a Na^+ és K^+ kationok mólaránya többé-kevésbé kiegyenlített, míg az anionok döntő hányadát a nagy rendszámú, következésképpen nagy átmérőjű ionok teszik ki, míg a kis rendszámú ionok mólaránya 20%, vagy az alatt marad.

Megkerestük azokat az összetételeket, amelyek egyféle kationt tartalmazva eredményezik a legalacsonyabb olvadáspontot (4. táblázat). A csak K^+ -t tartalmazó halogenid sók esetén az olvadáspont minimuma 428 °C, míg csak Na^+ kationtartalmú sók esetén 464 °C.

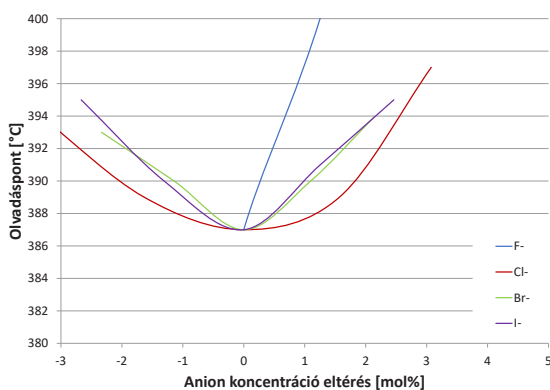
3. táblázat: A legalacsonyabb olvadáspontokat adó összetételek (móltört) és a hozzájuk tartozó olvadáspont értékek

$Na^+/(Na^++K^+)$	$K^+/(Na^++K^+)$	$Cl^-/(Cl^-+F^-+Br^-+I^-)$	$F^-/(Cl^-+F^-+Br^-+I^-)$	$Br^-/(Cl^-+F^-+Br^-+I^-)$	$I^-/(Cl^-+F^-+Br^-+I^-)$	T_m [°C]
0,44	0,56	0,2	0,00	0,44	0,36	387
0,63	0,37	0,14	0,00	0,25	0,61	383

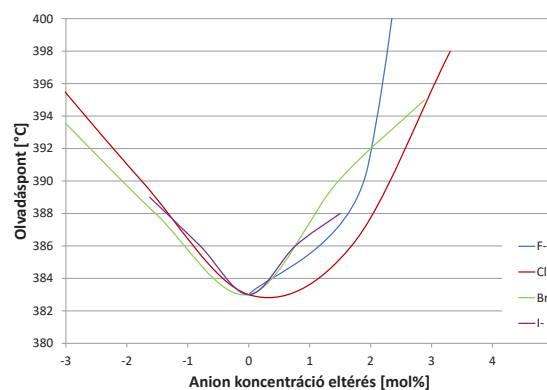
Vizsgáltuk, hogy a 3. táblázatban közölt összetételek (a továbbiakban: 1. sor: 1. összetétel; 2. sor: 2. összetétel) kismértékű módosítása miként befolyásolja a sókeverékek olvadáspontját. Az 1. ábrán a két összetétel kation koncentráció változtatásának hatását mutatjuk be, ahol 2,5% eltérés mintegy 8-12 °C olvadáspont növekedést eredményez.



1. ábra: A Na^+ ion koncentrációjának ($Na^+/(Na^++K^+)$) hatása a 3. táblázatban közölt összetételek olvadáspontjára



2. ábra: Az anionok koncentrációjának ($X^-/(F^-+Cl^-+Br^-+I^-)$) hatása a 3. táblázatban közölt 1. összetétel olvadáspontjára



3. ábra: Az anionok koncentrációjának ($X^-/(F^-+Cl^-+Br^-+I^-)$) hatása a 3. táblázatban közölt 2. összetétel olvadáspontjára

4. táblázat: Kizárólag Na^+ , illetve K^+ kationt tartalmazó legalacsonyabb olvadáspontokat adó összetételek (móltört) és a hozzájuk tartozó olvadáspont értékek

$Na^+/(Na^++K^+)$	$K^+/(Na^++K^+)$	$Cl^-/(Cl^-+F^-+Br^-+I^-)$	$F^-/(Cl^-+F^-+Br^-+I^-)$	$Br^-/(Cl^-+F^-+Br^-+I^-)$	$I^-/(Cl^-+F^-+Br^-+I^-)$	T_m [°C]
0	1	0,2	0,2	0,25	0,35	428
1	0	0,2	0,05	0,3	0,45	464

Az anionok koncentráció-változtatásának olvadáspontra gyakorolt hatását a 2. (1. összetétel) és a 3. (2. összetétel) ábrán mutatjuk be. Az 1. összetétel esetén a F^- -ion megjelenése okozza a legszembetűnőbb változást. Ez a 2. összetétel esetén kevésbé észrevehető. A Cl^- -ion koncentráció módosítása az 1. összetételnél kevésbé hat az olvadáspontra, míg a 2. összetételnél markánsabb a befolyása.

4. Összefoglalás

Jelen munkák során FactSage szoftver és adatbázis segítségével vizsgáltuk, hogy többkomponensű, Na^+ és K^+ kationokból, valamint F^- , Cl^- , Br^- és I^- anionokból álló sókeverékek összetétele miként befolyásolja az olvadáspontot, annak minimumát keresve. A számítás során az összetevők koncentrációinak 5 mol%-os változtatása mellett az elérhető legkisebb olvadáspont $383\text{ }^\circ\text{C}$ -nak adódott. Az ehhez tartozó összetétel: 63 mol% Na^+ és 37 mol% K^+ (a kationok százalékában), 14 mol% Cl^- , 0 mol% F^- , 25 mol% Br^- és 61 mol% I^- (az anionok százalékában).

A $400\text{ }^\circ\text{C}$ alatti olvadáspontú összetételekre jellemző, hogy a kationok aránya kiegyenlített (35-65 mol%), az anionok között a nagy rendszámú anionok dominálnak (75-80 mol%), a maradék Cl^- (20-25 mol%), a F^- koncentrációja 0%.

Megállapítottuk, hogy kizárólag Na^+ illetve K^+ kationt tartalmazó keverékekkel 464, illetve $428\text{ }^\circ\text{C}$ legalacsonyabb olvadáspont érhető el.

Valamint vizsgáltuk azt is, hogy a kiválasztott összetételű sókeverékek olvadáspontja mennyire érzékeny az egyes ionok koncentrációjának változására. Megállapítottuk, hogy az egyes ionok koncentráció-változásának hatása függ a kiinduló összetételtől, jellemzően $5\text{-}15\text{ }^\circ\text{C}$ olvadáspont-növekedést jelent valamely anion vagy kation 2,5 mol%-nyi koncentráció-változása.

Köszönetnyilvánítás

A TKP2020-NKA-18 számú projekt az Innovációs és Technológiai Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a 2020-4.1.1-TKP2020 program finanszírozásában valósult meg.

Irodalomjegyzék

- [1] Xiaolan Wei, Ming Song, Qiang Peng, Jing Ding, Jianping Yang: A New Ternary Chloride Eutectic Mixture and its Thermo-physical Properties for Solar Thermal Energy Storage; Energy Procedia, 2014
- [2] Jing Ding, Gechuanqi Pan, Lichan Du, Jianfeng Lu, Xiaolan Wei, Jiang Li, Weilong Wang, Jinyue Yan: Theoretical prediction of the local structures and transport properties of binary alkali chloride salts for concentrating solar power; Nano Energy, 2017
- [3] Murat M. Kenisarin. High-temperature phase change materials for thermal energy storage; Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2010
- [4] D. Sergeev, E. Yazhenskikh, P. Haseli, M. Liu, M. Ziegner, F. Bruno, M. Müller: Experimental study of thermodynamic properties and phase equilibria in Na_2CO_3 - K_2CO_3 system; CALPHAD: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry 71, 2020
- [5] D. Sergeev, E. Yazhenskikh, D. Kobertz, K. Hack, M. Müller: Phase equilibria in the reciprocal $NaCl$ - KCl - $NaNO_3$ - KNO_3 system; CALPHAD: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry 51, 2015
- [6] Carolina Villada, Wenjin Ding, Alexander Bonk, Thomas Bauer: Simulation-Assisted Determination of the Minimum Melting Temperature Composition of $MgCl_2$ - KCl - $NaCl$ Salt Mixture for Next-Generation Molten Salt Thermal Energy Storage; Frontiers in Energy Research, 2022
- [7] Rafael Bolivar, Bernd Friedrich: The influence of increased $NaCl$: KCl ratios on Metal Yield in salt bath smelting processes for aluminium recycling; World of Metallurgy - ERZMETALL, 2009
- [8] Yu-Ting Wua, Ying Lia, Nan Renb, Rui-Ping Zhia, Chong-Fang Maa: Experimental study on the thermal stability of a new molten salt with low melting point for thermal energy storage applications; Solar Energy Materials and Solar Cells 176, 2018
- [9] Hojong Kim, Dane A. Boysen, Jocelyn M. Newhouse, Brian L. Spatocco, Brice Chung, Paul J. Burke et al.: Liquid metal batteries: Past, present, and future; Chem. Rev. 2013
- [10] Kaixuan Cui, Wang Zhao, Shengwei Li, Dongmei Zhou, Chunrong

- Liu, Xuanhui Qu, Ping Li: Low-Temperature and High-Energy-Density Li-Based Liquid Metal Batteries Based on LiCl-KCl Molten Salt Electrolyte; ACS Sustainable Chem. Eng. 2022
- [11] Yu Ding, Xuelin Guo, Guihua Yu: Next-Generation Liquid Metal Batteries Based on the Chemistry of Fusible Alloys; ACS Cent. Sci. 2020
- [12] M.Elena Arroyo-de Dompablo, Alexandre Ponrouch, Patrik Johansson, M. Rosa Palacín: Achievements, Challenges, and Prospects of Calcium Batteries; Chem. Rev. 2020
- [13] S.V.Devyatkin, G.Kaptay: Chemical and Electrochemical Behaviour of Titanium Diboride in Cryolite-Alumina Melt and in Molten Aluminum; J Solid State Chem, 2000, vol.154, pp.107-109
- [14] Kaptay G. : Estimation of excess thermodynamic functions of aluminum monochloride dissolved in alkali chloride melts; Mater Sci Forum, 1991, vol. 73-75, pp. 101-108.
- [15] Akhmedov S.N., Kaptay G., Borisoglebskii Yu. V., Gorlanov E. S., Karimov M.I., Vetyukov M.M.: Chemical and electrochemical behaviour of some 'new materials' in molten salts to be used for aluminium electrolysis; Molten Salt Forum vol. 1-2 (1993/94) pp. 231-232
- [16] Deviatkin S.V., Kaptay G.: Influence of nature of the alkali metal cation on Ti(III) - e = Ti(IV) electrochemical process in chloride melts; Molten Salt Forum vol. 1-2 (1993/94) pp. 129-138.
- [17] Kaptay Gy., Deviatkin S.V., Berecz E., Shapoval V.I.: Átmeneti fémborid bevonatok elektrokémiai szintézise sóolvadékokból; Gépjártástechnológia, 1991. XXXI. évf., 10. sz., 445-446 o.
- [18] Devyatkin S.V., Kaptay G., Poignet J.-C., Bouteillon J.: Electrochemical Synthesis of Titanium Diboride Coatings from Cryolite Melts; Molten Salts Forum 5-6 (1998) 331-334.
- [19] G. Kaptay, S.A. Kuznetsov: Electrochemical synthesis of refractory borides from molten salts – Review paper; Plasmas & Ions, 2 (1999) 45-56.
- [20] S.V.Devyatkin, O.I.Boiko, N.N.Uskova, G.Kaptay: Electrochemical Synthesis of Titanium Silicides from Molten Salts; Z. Naturforsch B, 2001, vol. 56 a, pp.739-740.
- [21] J. Miklósi, P.Póczik, I.Sytchev, K.Papp, G.Kaptay, P.Nagy, E.Kálmán: Atomic force microscopy investigation of electrochemically produced carbon nanotubes; Appl. Phys., 2001, vol. A72, pp. S189-S192
- [22] I.Lukovits, A.Gaovac, E.Kálmán, G.Kaptay, P.Nagy, S.Nikolic, J.Sytchev, N.Trinajstić: Nanotubes: Number of Kekulé Structures and Aromaticity; J. Chem. Inf. Comput. Sci., 2003, vol.43, pp.609-614.
- [23] J.Sytchev, G.Kaptay: Influence of alkali metal on the erosion of a graphite cathode and morphology of carbon nanotubes. Electrochim Acta, 2009, vol.54, pp. 6725-6731.
- [24] T.Gábor, F.H.Kármán, J.Sytchev, E.Kálmán, G.Kaptay: The separation of carbon nanotubes from chlorides; Carbon, 2009, vol.47, pp.1195-1198.
- [25] D.Madarasz, I.Budai, G.Kaptay: Fabrication of SiC-particles shielded Al-spheres upon recycling Al/SiC composites; Metal Mater Trans A, 2011, vol.42, pp. 1439-1443
- [26] P.Baumli, J.Sytchev, Zs.H.Göndör, G.Kaptay: Interaction between a titanium-containing molten salt and an alumina plate. Mater Sci Forum, 2005, vols. 473-474, pp.39-44.
- [27] P.Baumli, G.Kaptay: Wettability of carbon surfaces by molten alkali chloride mixtures. Mater Sci Forum, 2008, vol.589, pp.355-359
- [28] P.Baumli, G.Kaptay: Wettability of carbon surfaces by pure molten alkali chlorides and their penetration into a porous graphite substrate. Mater Sci Eng A, 2008, vol.495, pp.192-196.
- [29] P.Baumli, J.Sytchev, G.Kaptay: Perfect wettability of carbon by liquid aluminum achieved by a multifunctional flux; J Mater Sci, 2010, vol.45, pp. 5177-5190
- [30] K.L.Juhasz, P.Baumli, J.Sytchev, G.Kaptay: Wettability of a graphite crucible by liquid aluminum under molten potassium halide fluxes; J Mater Sci, 2013, vol.48, pp. 7679-7685.
- [31] Somlyai-Sipos L., Baumli P., Kaptay G., Bálint P., Dezső A., Simon A., Gácsi Z., A. Lekatou, T. Sfikas, A. Karantzalis: Volfrám-karbid szemcsékkel erősített alumínium mátrixú kompozit fejlesztése. BKL Kohászat, 2015, vol.148, No.2, pp.34-39
- [32] A. Lekatou, A. E. Karantzalis, A. Evangelou, V. Gousia, G. Kaptay, Z. Gacsi, P. Baumli, A. Simon: Aluminium reinforced by WC and TiC nanoparticles (ex-situ) and aluminide particles (in-situ): Microstructure, wear and corrosion behavior. Mater Design, 2015, vol.65, pp. 1121-1135.
- [33] J.L.Aragones, E. Sanz, C.Valeriani, C.Vega: Calculation of the melting point of alkali halides by means of computer simulations; J. Chem. Phys. 137, 104507 (2012)
- [34] Marie-Madeleine Walz, David van der Spoel: Systematically improved melting point prediction: a detailed physical simulation model is required; Chem Commun (Camb), 2019
- [35] Marie-Madeleine Walz, David van der Spoel: Molten alkali halides – temperature dependence of structure, dynamics and thermodynamics; Phys. Chem. Chem. Phys., 2019
- [36] David R. Rosseinsky, Keith Stead: Alkali-halide lattice energies, melting, and the scaling of lattice properties; Journal of Physics and Chemistry of Solids 60, 1999
- [37] Dmitry Zakiryanov, Mikhail Kobelev, Nikolai Tkachev: Melting properties of alkali halides and the cation-anion size difference: A molecular dynamics study; Fluid Phase Equilibria 506, 2020
- [38] Dmitry Olegovich Zakiryanov, Nikolai Konstantinovich Tkachev: Thermal conductivity of molten alkali halides: The phenomenology and molecular dynamic simulations; International Journal of Heat and Mass Transfer 181, 2021
- [39] Alexander G. Davydov, Nikolai K. Tkachev: Heat capacity of molten alkali halides; Journal of Molecular Liquids 356, 2022
- [40] C.W.Bale et al.: FactSage thermochemical software and databases, 2010–2016; Calphad 54. 2016
- [41] Jung, I.H., Van Ende, M.A.: Computational Thermodynamic Calculations: FactSage from CALPHAD Thermodynamic Database to Virtual Process Simulation; Metall Mater Trans B 51, 2020
- [42] Li Hanxu, Yoshihiko Ninomiya, Dong Zhongbing, Zhang Mingxu: Application of the FactSage to Predict the Ash Melting Behavior in Reducing Conditions, Chinese J. Chem. Eng., 14. 2006