

УДК 541.13+623.454

## Термодинамическое моделирование высокотемпературного поведения арсенидов натрия и калия

Н. М. Барбин<sup>1,2</sup>, М. А. Шумилова<sup>1</sup>, О. Ю. Гончаров<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Россия, 426067, Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

<sup>2</sup> Уральский институт государственной противопожарной службы МЧС России, Россия, 620062, Екатеринбург, ул. Мира, 22

**Аннотация.** Широкое применение неорганических соединений мышьяка в различных отраслях производства требует изучения их физико-химических свойств, в том числе, термических процессов с их участием. Методом термодинамического моделирования было исследовано высокотемпературное поведение  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$ ,  $\text{K}_3\text{AsO}_3$ ,  $\text{Na}_3\text{AsO}_3+\text{NaF}$ ,  $\text{K}_3\text{AsO}_3+\text{KF}$ . Рассчитаны равновесные составы конденсированной фазы при температурах до 1900 К в атмосфере аргона. Установлено, что арсениды натрия и калия являются устойчивыми соединениями и могут образовывать ионные расплавы. Дан анализ полученных результатов, характеризующих устойчивость конденсированной фазы.

**Ключевые слова:** арсениды натрия, арсениды калия, фториды натрия, фториды калия, термодинамическое моделирование.

✉ Николай Барбин, e-mail: [NMBarbin@mail.ru](mailto:NMBarbin@mail.ru)

## Thermodynamic Modeling of High-temperature Behavior of Sodium and Potassium Arsenites

Nikolai M. Barbin<sup>1,2</sup>, Marina A. Shumilova<sup>1</sup>, Oleg Y. Goncharov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Udmurt Federal Research Center UB RAS (34, T. Baramzina St., Izhevsk, 426067, Russian Federation)

<sup>2</sup> Ural Institute of the State Fire Service of the Ministry of Emergency Situations of Russia (22, Mira St., Yekaterinburg, 620062, Russian Federation)

**Summary.** The widespread use of inorganic arsenic compounds in various branches of industry requires the study of their physicochemical properties, including thermal processes with their participation. During the calculations, the systems of sodium arsenite, potassium arsenite, sodium arsenite with the addition of sodium fluoride, and potassium arsenite with the addition of potassium fluoride were considered. The pyrolysis of arsenites upon heating to temperatures of 1900 K in an argon atmosphere was analyzed by thermodynamic modeling. It has been established that sodium and potassium arsenites, being stable compounds, undergo pyrolysis upon heating to 1900 K with the formation of a melt (solid solution). With increasing temperature, the composition of the melt is averaged over the anions  $\text{AsO}_3^{3-}$  and  $\text{AsO}_4^{3-}$  regardless of whether the arsenites or arsenates of alkali metals have been initially taken. In the pyrolysis of all the studied systems up to 1000-1500 K, the main component of the gas phase is  $\text{As}_4\text{O}_6$ . At higher temperatures, a set of compounds  $\text{AsO}$ ,  $\text{AsO}_2$ ,  $\text{As}_4\text{O}_6$ ,  $\text{Na}$ ,  $\text{NaO}$  ( $\text{KO}$ ),  $\text{Na}_2\text{O}$  ( $\text{K}_2\text{O}$ ),  $\text{O}$ ,  $\text{O}_2$  is formed in the gas phase. When fluorides are added in all systems in the gas phase above 1000 K,  $\text{NaF}$  ( $\text{KF}$ ) vapors are formed, which does not significantly affect the content of other components in the gas phase. The thermal stability of all the studied systems is characterized by similar values and decreases with increasing temperature. At temperatures above 1600 K, the stability of the  $\text{K}_3\text{AsO}_3$  system is higher than that of the other systems.

**Keywords:** sodium arsenites, potassium arsenites, sodium fluorides, potassium fluorides, thermodynamic modeling.

✉ Nikolai Barbin, e-mail: [NMBarbin@mail.ru](mailto:NMBarbin@mail.ru)

## ВВЕДЕНИЕ

Неорганические соединения мышьяка нашли широкое применение в различных отраслях производства: цветной металлургии и нефтяной промышленности, в стекольной промышленности и изготовлении зеркал [1], в производстве полупроводников и в инфракрасной оптике, в электронике, в качестве реагентов в химическом анализе и при

получении мышьяксодержащих продуктов [2 – 4]. Добыча и переработка мышьяксодержащих руд, их металлургический передел являются одним из основных источников загрязнения окружающей среды данным металлом, поэтому все более значимой становится проблема утилизации и обезвреживания мышьяксодержащих промышленных отходов и стоков [5 – 8]. Следует учитывать, что работа с соединениями мышьяка экологически небезопасна и представляет сложную техническую проблему, для решения которой, в том числе, необходимы знания их физико-химических свойств, в частности, ряда термических и термодинамических параметров. Для разработки новых технологий [9] также необходимо изучение высокотемпературного поведения арсенитов натрия и калия, поэтому целью представленной работы является изучение методом термодинамического моделирования термической стабильности равновесных систем арсенита натрия и калия.

## МЕТОДИКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Термодинамическое моделирование (ТДМ) является разновидностью анализа термодинамических систем для прогнозирования результатов проведения химических процессов в конкретных установках и оптимизации условий проведения таких процессов, что позволяет существенно сократить сроки и снизить стоимость экспериментальных исследований.

Для исследования равновесного поведения арсенитных систем использовали методологию термодинамического моделирования [10], основываясь на опыте ее успешного применения [11 – 13].

Для расчетов использовали программный комплекс ТЕРРА [14], предназначенный для анализа термодинамических систем, которые являются закрытыми и изолированными и могут быть гетерогенными. Расчет равновесного состава в программном комплексе связан с поиском такого состава, который соответствует условному максимуму энтропии в соответствии со вторым законом термодинамики.

Термодинамические функции индивидуальных веществ взяты из баз данных ИВТАНТЕРМО, АСТРА, ТЕРРА, основу которых составляют справочные сведения о термодинамических свойствах индивидуальных веществ, например, [15].

При проведении расчетов рассматривалось несколько систем, в которых анализировался пиролиз арсенитов при нагревании в атмосфере аргона до температур 1900 К. Соотношение конденсированной и газовой фаз составляло 5:1. В первой системе проводился анализ нагревания арсенита натрия  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$ , во второй системе – арсенита калия  $\text{K}_3\text{AsO}_3$ , в третьей системе – арсенита натрия  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$  с добавлением  $\text{NaF}$  ( $\text{Na}_3\text{AsO}_3/\text{NaF}=10/1$ ), в четвертой системе – арсенита калия  $\text{K}_3\text{AsO}_3$  с добавлением  $\text{KF}$  ( $\text{K}_3\text{AsO}_3/\text{KF}=10/1$ ).

Для описания конденсированных фаз использовали модель идеального раствора продуктов разложения соответствующих арсенитов.

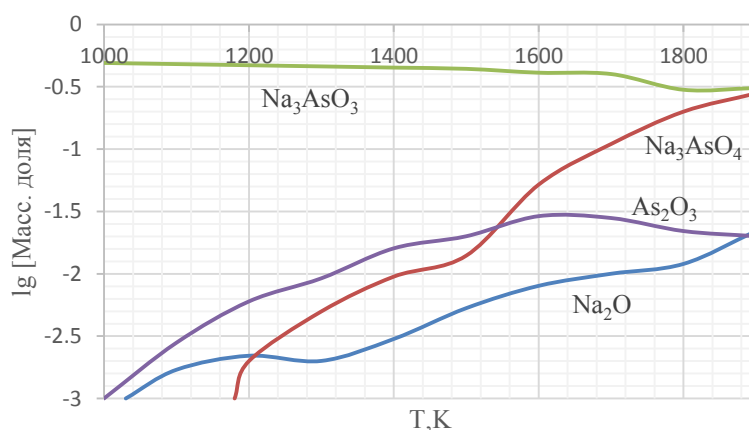
## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

### Пиролиз $\text{Na}_3\text{AsO}_3$

Полученные в результате расчетов температурные зависимости равновесного состава (содержания компонентов) конденсированной фазы представлены на рис. 1.

На рисунке представлены наиболее значимые компоненты, для которых в температурном интервале 1000 – 1900 К в равновесной конденсированной фазе концентрация больше 0.001 масс. дол.:  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$ ,  $\text{As}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Na}_3\text{AsO}_4$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$ .

Как следует из анализа результатов (рис. 1) исходный арсенит  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$  является основным компонентом конденсированной фазы. Содержание компонента  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$  уменьшается с нагреванием от 0.49 масс. дол. при 1000 К до 0.40 масс. дол. при 1700 К и далее до 0.150 масс. дол. при 1900 К.



**Рис. 1. Система  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$ . Равновесный состав конденсированной фазы**

Fig. 1. The  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$  system. The equilibrium composition of the condensed phase

Концентрация  $\text{Na}_3\text{AsO}_4$  увеличивается с повышением температуры в температурном интервале 1200 – 1400 от 0.002 до 0.0095 масс. дол., в температурном интервале 1500 – 1900 К от 0.014 до 0.280 масс. дол.

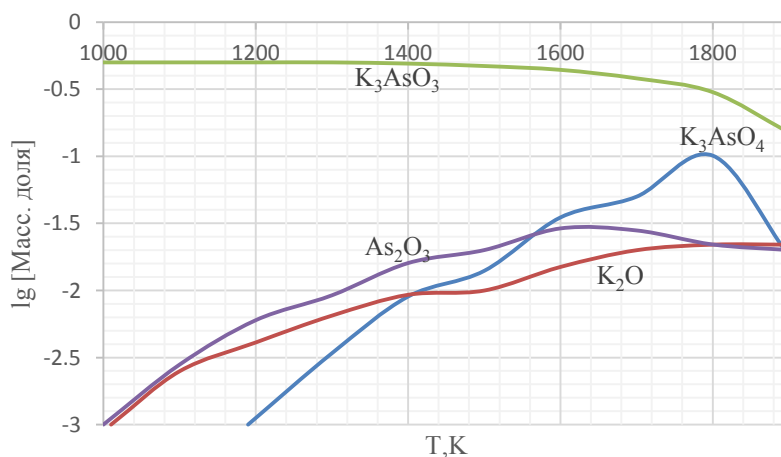
Содержание  $\text{As}_2\text{O}_3$  возрастает в интервале от 1000 – 1700 К от 0.001 до 0.028 масс. дол., при дальнейшем повышении температуры до 1900 К уменьшается до 0.020 масс. дол. Концентрация  $\text{Na}_2\text{O}$  возрастает от 0.001 масс. дол. при 1030 К до 0.022 масс. дол. при 1900 К.

Поскольку соединения, входящие в изучаемую систему, имеют температуру плавления выше 1500 К, то данная система при высоких температурах представляет собой расплав-раствор, в котором при разложении исходного  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$  образуются в заметных количествах  $\text{Na}_3\text{AsO}_4$ ,  $\text{As}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$ .

В газовой фазе при пиролизе  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$  образуется набор соединений  $\text{AsO}$ ,  $\text{AsO}_2$ ,  $\text{As}_4\text{O}_6$ ,  $\text{Na}$ ,  $\text{NaO}$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{O}_2$ , причем до 1500 К преимущественно образуется  $\text{As}_4\text{O}_6$ , а при более высоких температурах – остальные соединения. Для других изученных систем состав газовой фазы практически тот же, только в системах с калием вместо оксидов натрия в газовую фазу переходят оксиды калия.

### Пиролиз $\text{K}_3\text{AsO}_3$

При пиролизе  $\text{K}_3\text{AsO}_3$  в температурном интервале 1000 – 1900 К в равновесной конденсированной фазе наиболее значимыми компонентами являются  $\text{K}_3\text{AsO}_3$ ,  $\text{As}_2\text{O}_3$ ,  $\text{K}_2\text{O}$ ,  $\text{K}_3\text{AsO}_4$  с концентрацией больше 0.001 масс. дол. (рис. 2).



**Рис. 2. Система  $\text{K}_3\text{AsO}_3$ . Равновесный состав конденсированной фазы**

Fig. 2. The  $\text{K}_3\text{AsO}_3$  system. The equilibrium composition of the condensed phase

Основным компонентом равновесной конденсированной фазы является  $K_3AsO_3$ , содержание которого уменьшается от 0.5 масс. дол. при 1000 К до 0.380 масс. дол. при 1700 К. Дальнейшее повышение температуры до 1900 К ведет к уменьшению концентрации до 0.150 масс. дол.

Содержание  $K_3AsO_4$  увеличивается от 0.0034 масс. дол. при 1300 К до 0.101 масс. дол. при 1800 К, повышение температуры до 1900 К ведет к уменьшению до 0.018 масс. дол.

Содержание  $As_2O_3$  увеличивается от 0.001 масс. дол. при 1000 К до 0.028 масс. дол. при 1700 К, а затем при повышении температуры до 1900 К уменьшается до 0.020 масс. дол.

Содержание  $K_2O$  увеличивается от 0.001 масс. дол. при 1010 К до 0.022 масс. дол. при 1900 К.

Данная система также содержит соединения с температурой плавления выше 1500 К и поэтому при высоких температурах представляет собой расплав-раствор, в котором кроме исходного  $K_3AsO_3$  в заметных количествах присутствуют  $K_3AsO_4$  и  $As_2O_3$ ,  $K_2O$ .

### Пиролиз $Na_3AsO_3$ с добавлением $NaF$ ( $Na_3AsO_3/NaF=10/1$ )

В данной системе в температурном интервале 1000 – 1900 К в равновесной конденсированной фазе наиболее значимыми компонентами являются  $Na_3AsO_3$ ,  $NaF$ ,  $Na_3AsO_4$ ,  $As_2O_3$ ,  $Na_2O$  с концентрацией больше 0.001 масс. дол. (рис. 3).

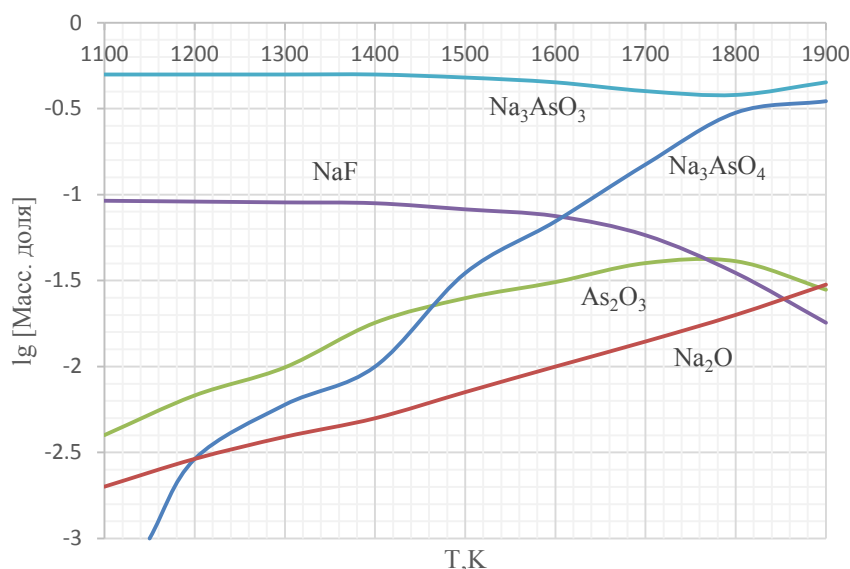


Рис. 3. Система  $Na_3AsO_3+NaF$ . Равновесный состав конденсированной фазы

Fig. 3. The  $Na_3AsO_3+NaF$  system. The equilibrium composition of the condensed phase

Основным компонентом равновесной конденсированной фазы является  $Na_2AsO_3$ , количество которого уменьшается от 0.500 масс. дол. при 1100 К до 0.380 масс. дол. при 1800 К и возрастает до 0.450 масс. дол. при 1900 К.

Содержание  $NaF$  уменьшается от 0.092 масс. дол. при 1100 К до 0.018 масс. дол. при 1900 К.

Концентрация  $Na_3AsO_4$  возрастает от 0.001 масс. дол. при 1150 К до 0.350 масс. дол. при 1900 К

Содержание  $As_2O_3$  увеличивается от 0.004 масс. дол. при 1100 К до 0.041 масс. дол. при 1800 К и уменьшается до 0.028 масс. дол. при повышении температуры до 1900 К.

Концентрация  $Na_2O$  возрастает от 0.002 масс. дол. при 1100 К до 0.030 масс. дол. при 1900 К.

Поскольку соединения, входящие в изучаемую систему, имеют температуру плавления больше 1200 К, то данная система представляет собой расплав – раствор арсенатов, арсенитов,  $Na_2O$  и фторидов натрия.

При добавлении фторидов в данной системе и далее в газовой фазе при нагревании системы выше 1000 К образуются пары NaF (KF), что существенно не меняет содержание в газовой фазе  $As_4O_6$ , AsO,  $AsO_2$ , Na, NaO, KO,  $Na_2O$ ,  $K_2O$ .

#### Пиролиз $K_3AsO_3$ с добавлением KF ( $K_3AsO_3/KF=10/1$ )

В данной системе в температурном интервале 1000 – 1900 К в равновесной конденсированной фазе наиболее значимыми компонентами являются  $K_3AsO_3$ , KF,  $K_3AsO_4$ ,  $K_2O$  с концентрацией больше 0.001 масс. дол. (рис. 4).

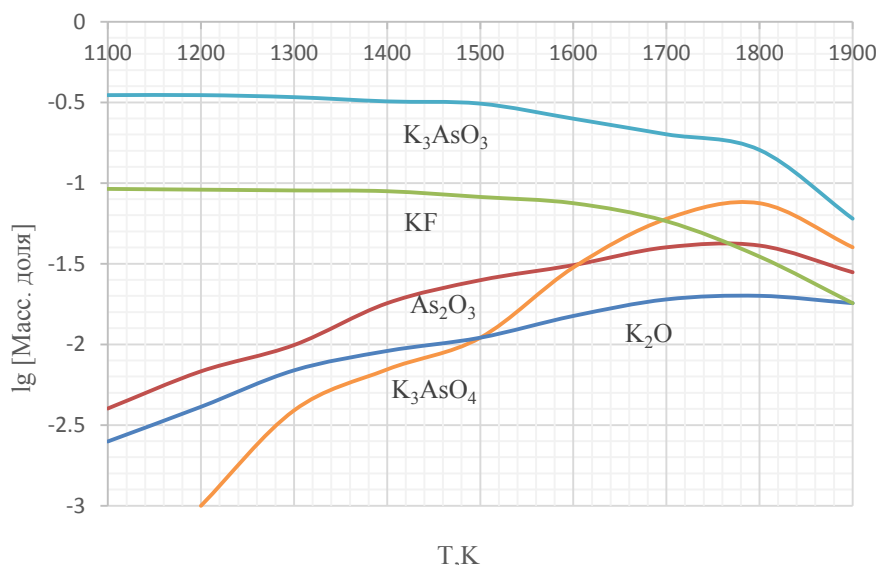


Рис. 4. Система  $K_3AsO_3+KF$ . Равновесный состав конденсированной фазы

Fig. 4. The  $K_3AsO_3+KF$  system. The equilibrium composition of the condensed phase

Основным компонентом равновесной конденсированной фазы является  $K_3AsO_3$ , содержание которого уменьшается от 0.350 масс. дол. при 1100 К до 0.320 масс. дол. при 1500 К, при дальнейшем повышении температуры до 1800 К уменьшается до 0.150 масс. дол., при 1900 К – 0.060 масс. дол.

Содержание KF уменьшается от 0.092 масс. дол. при 1100 К до 0.018 масс. дол. при 1900 К.

Содержание  $As_2O_3$  увеличивается от 0.004 масс. дол. при 1100 К до 0.041 масс. дол. при 1800 К и уменьшается до 0.028 масс. дол. при повышении температуры до 1900 К.

Концентрация  $K_3AsO_4$  возрастает от 0.001 масс. дол. при 1200 К до 0.075 масс. дол. при 1800 К и уменьшается до 0.040 масс. дол. при 1900 К.

Содержание  $K_2O$  возрастает от 0.0025 масс. дол. при 1100 К до 0.018 масс. дол. при 1900 К.

В системе  $K_3AsO_3$  с добавлением KF образуются соединения с температурой плавления выше 1200 К, при которой данная система представляет собой расплав-раствор арсенатов, арсенитов, оксидов и фторидов калия.

Результаты расчетов для всех систем  $Na_3AsO_3$  (рис. 1),  $K_3AsO_3$  (рис. 2),  $Na_3AsO_3 + NaF$  (рис. 3),  $K_3AsO_3 + KF$  (рис. 4) показывают, что при термической диссоциации в системах соответственно образуются соединения натрия ( $Na_3AsO_3$ ,  $Na_3AsO_4$ ,  $Na_2O$ ) или калия ( $K_3AsO_3$ ,  $K_3AsO_4$ ,  $K_2O$ ), а также во всех системах образуется оксид мышьяка ( $As_2O_3$ ). С ростом температуры распад исходных соединений увеличивается, но были некоторые отличия в области высоких температур. В результате расчетов получены данные о равновесном составе, то есть о содержании в равновесии исходных веществ ( $a_i$ ) и компонентов, которые образуются при их распаде ( $b_j$ ).

Термическая стабильность рассмотренных систем ( $Na_3AsO_3$ ,  $K_3AsO_3$ ,  $Na_3AsO_3+NaF$ ,  $K_3AsO_3+KF$ )  $n_i$  оценивалась по уравнению:

$$n_i = a_i / \sum b_j, \quad (1)$$

где  $a_i$  – равновесное содержание исходных компонентов (масс. доли) в системе  $i$ , соответственно для систем  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$ ,  $\text{K}_3\text{AsO}_3$ ,  $\text{Na}_3\text{AsO}_3+\text{NaF}$ ,  $\text{K}_3\text{AsO}_3+\text{KF}$ ;  $\sum b_j$  – сумма равновесных содержаний (масс.доли) образующихся в равновесии компонентов,  $j = \text{Na}_3\text{AsO}_4$ ,  $\text{As}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$ ,  $\text{K}_3\text{AsO}_4$ ,  $\text{K}_2\text{O}$ ,  $\text{KF}$ ,  $\text{NaF}$ .

Результаты расчетов термической стабильности для всех исследованных систем представлены на рис. 5. Термическая стабильность равновесных систем  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$  и  $\text{K}_3\text{AsO}_3$  при температурах 1000 – 1600 К близка. Различия наблюдаются только выше температур 1600 К, при которых  $\text{K}_3\text{AsO}_3$  немного более стабилен. Добавление фторида  $\text{NaF}$  к  $\text{Na}_3\text{AsO}_3$  не вызывает существенного изменения термической стабильности. Добавление  $\text{KF}$  к  $\text{K}_3\text{AsO}_3$  ведет к уменьшению термической стабильности в температурном интервале 1650 – 1900 К.

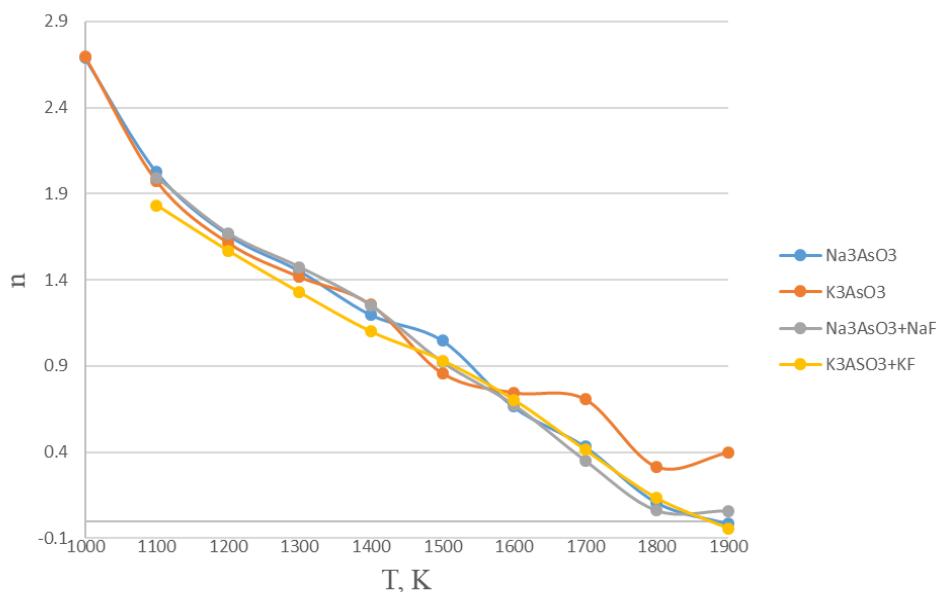


Рис. 5. Термическая стабильность арсенитных равновесных систем

Fig. 5. Thermal stability of arsenite-equilibrium systems

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам моделирования можно сделать следующие заключения и предложения. Арсениты натрия и калия являются устойчивыми соединениями и при нагревании до 1900 К подвергаются пиролизу с образованием расплава (твёрдого раствора).

Считая расплавы ионными, можно констатировать присутствие в них ионов:  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{AsO}_3^{3-}$ ,  $\text{AsO}_4^{3-}$ ,  $\text{O}^{2-}$ ,  $\text{As}^{3+}$ . Введение фторида натрия и калия приводит к появлению расплава, содержащего  $\text{F}^-$ .

Увеличение температуры способствует усреднению состава расплава по анионам  $\text{AsO}_3^{3-}$  и  $\text{AsO}_4^{3-}$  независимо от того, взяты исходные арсениты или арсенаты щелочных металлов; увеличению концентрации  $\text{O}^{2-}$  и  $\text{As}^{3+}$ .

При пиролизе всех исследованных систем до 1000 – 1500 К основным компонентом газовой фазы является  $\text{As}_4\text{O}_6$ . При более высоких температурах в газовой фазе образуется набор соединений  $\text{AsO}$ ,  $\text{AsO}_2$ ,  $\text{Na}$ ,  $\text{NaO}$  ( $\text{KO}$ ),  $\text{Na}_2\text{O}$  ( $\text{K}_2\text{O}$ ),  $\text{O}$ ,  $\text{O}_2$ . Данный состав газовой фазы соответствует термодинамическому равновесию. При добавлении фторидов во всех системах в газовой фазе выше 1000 К образуются пары  $\text{NaF}$  ( $\text{KF}$ ), что существенно не меняет содержание остальных компонентов в газовой фазе.

Термические стабильности всех исследованных систем близки и падают с ростом температуры. Только выше температур 1600 К стабильность системы  $\text{K}_3\text{AsO}_3$  выше, чем у других систем.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рухиладзе В. Г. Мышьяк. М.: Metallurgiya, 1969. 189 с.
2. Воробьев В. Л., Соколов Е. Б. Методы получения мышьяка высокой чистоты. М.: Минцветмет. СССР, 1967. 44 с.
3. Демахин А. Г., Акчурин С. В., Растегаев О. Ю., Ченцов А. М., Рыжков А. В., Малишевский А. О. Физико-химические свойства образцов промышленных партий "арсенита натрия гидролизного" // Теоретическая и прикладная экология, 2013. № 3. С. 81-86.
4. Демахин А. Г., Акчурин С. В., Федоров В. А. Применение арсенита натрия гидролизного для получения чистой мышьяксодержащей продукции // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Химия. Биология. Экология. 2019. Т. 19, вып. 1. С. 11-17.  
<https://doi.org/10.18500/1816-9775-2019-19-1-11-17>
5. Молдурushку М. О. Разработка технологии извлечения мышьяка из отходов аммиачно-автоклавного передела кобальтсодержащих руд: дисс. канд. техн. наук. Кызыл, 2018. 150 с.
6. Фокина С. Б. Методы очистки мышьяксодержащих сточных вод металлургических производств // Горный информационно-аналитический бюллетень (научно-технический журнал). 2012. № 2. С. 406-409.
7. Каримов К. А. Автоклавная переработка мышьяксодержащих промпродуктов медеплавильного производства: дисс. канд. техн. наук. Екатеринбург, 2016. 164 с.
8. Ченцов А. М., Растегаев О. Ю., Малишевский А. О., Толоконникова Т. П., Скворцов И. М. Реагентное извлечение мышьяка из технологических и сточных вод с помощью диоксида тиомочевина // Теоретическая и прикладная экология. 2013. № 3. С. 86-90.
9. Копылов Н. И., Каминский Ю. Д. Мышьяк. Новосибирск: Сибирское университетское издательство, 2004. 367 с.
10. Моисеев Г. К., Вяткин Г. П., Барбин Н. М. Применение термодинамического моделирования для изучения взаимодействий с участием ионных расплавов. Челябинск: Изд-во ЮУрГУ. 2002. 166 с.

## REFERENCES

1. Rukhiladze V. G. Mysh'yak [Arsenic]. Moscow: Metallurgiya Publ., 1969. 189 p.
2. Vorobyov V. L., Sokolov E. B. Metody polucheniya mysh'yaka vysokoy chistoty. [Methods for obtaining high purity arsenic]. Moscow: Mintsvetmet USSR Publ., 1967. 44 p.
3. Demakhin A. G., Akchurin S. V., Rastegaev O. Yu., Chentsov A. M., Ryzhkov A. V., Malishevsky A. O. Fiziko-khimicheskiye svoystva obraztsov promyshlennykh partiy arsenita natriya gidroliznogo [Physico-chemical properties of the samples of commercial batches of "sodium arsenite hydrolysis"]. *Teoreticheskaya i prikladnaya ekologiya* [Theoretical and Applied Ecology], 2013, no. 3, pp. 81-86. (In Russian).
4. Demakhin A. G., Akchurin S. V., Fedorov V. A. Primeneniye arsenita natriya gidroliznogo dlya polucheniya chistoy mysh'yaksoderzhashchey produktsii. [Application of hydrolytic sodium arsenite to obtain pure arsenic-containing products]. *Izvestiya Saratovskogo universiteta. Novaya seriya. Seriya: Khimiya. Biologiya. Ekologiya* [Izvestiya of Saratov University. Chemistry. Biology. Ecology], 2019, vol. 19, iss. 1. pp. 11-17. (In Russian).  
<https://doi.org/10.18500/1816-9775-2019-19-1-11-17>
5. Moldurushku M. O. *Razrabotka tekhnologii izvlecheniya mysh'yaka iz otkhodov ammiachno-avtoklavnogo peredela kobal'tsoderzhashchikh rud* [Development of technology for the extraction of arsenic from the waste of the ammonia-autoclave processing of cobalt-containing ores]: dis. kand. tekhn. nauk. Kyzyl, 2018. 150 p.
6. Fokina S. B. Metody ochistki mysh'yaksoderzhashchikh stochnykh vod metallurgicheskikh proizvodstv [Treatment methods for arsenic-containing wastewater from metallurgical industries]. *Gornyy informatsionno-analiticheskiy byulleten' (nauchno-tekhnicheskii zhurnal)* [Mining Information and Analytical Bulletin (Scientific and Tech. Journal)], 2012, no. 2, pp. 406-409. (In Russian).
7. Karimov K. A. *Avtoklavnaya pererabotka mysh'yaksoderzhashchikh promproduktov medeplavil'nogo proizvodstva* [Autoclave processing of arsenic-containing middlings of copper-smelting production]: dis. kand. tekhn. nauk. Yekaterinburg, 2016. 164 p.
8. Chentsov A. M., Rastegaev O. Yu., Malishevsky A. O., Tolokonnikova T. P., Skvortsov I. M. Reagentnoye izvlecheniye mysh'yaka iz tekhnologicheskikh i stochnykh vod s pomoshch'yu dioksida tiomocheviny [Reagent extraction of arsenic from process and waste water using thiourea dioxide]. *Teoreticheskaya i prikladnaya ekologiya* [Theoretical and Applied Ecology], 2013, no. 3. pp. 86-90. (In Russian).
9. Kopylov N. I., Kaminsky Yu. D. *Mysh'yak* [Arsenic]. Novosibirsk: Sib. univ. izd-vo Publ., 2004. 367 p.
10. Moiseev G. K., Vyatkin G. P., Barbin N. M. *Primeneniye termodinamicheskogo modelirovaniya dlya izucheniya vzaimodeystviy s uchastiyem ionnykh rasplavov* [Application of thermodynamic modeling to study interactions involving ionic melts]. Chelyabinsk: YuUrGU Publ., 2002. 166 p.

11. Барбин Н. М. Термодинамическое моделирование термического поведения расплавов  $\text{Li}_2\text{CO}_3 + \text{Na}_2\text{CO}_3$  и  $\text{CaCO}_3 + \text{Na}_2\text{CO}_3$  // Химическая физика и мезоскопия. 2008. Т. 10, № 3. С. 354-360.

12. Терентьев Д. И., Барбин Н. М., Борисенко А. В. Термодинамическое моделирование испарения расплавов  $\text{Pb}+\text{Bi}$  при различных давлениях // Химическая физика и мезоскопия, 2011. Т. 13, № 3. С. 350-355.

13. Петров В. Г., Трубачев А. В. Моделирование равновесного состава фаз при осаждении сульфидов мышьяка из реакционных масс детоксикации люзита // Химическая физика и мезоскопия, 2009. Т. 11, № 1. С. 35-39.

14. Трусов Б. Г. Компьютерное моделирование фазовых и химических равновесий // Инженерный вестник. 2012. № 8. С. 77-48211/483186.

15. Гурвич Л. В., Вейц И. В., Медведев В. А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. 1-4. М.: Наука, 1978-1982.

11. Barbin N. M. Termodinamicheskoye modelirovaniye termicheskogo povedeniya rasplavov  $\text{Li}_2\text{CO}_3 + \text{Na}_2\text{CO}_3$  i  $\text{CaCO}_3 + \text{Na}_2\text{CO}_3$  [Thermodynamic modeling of the thermal behavior of  $\text{Li}_2\text{CO}_3 + \text{Na}_2\text{CO}_3$  and  $\text{CaCO}_3 + \text{Na}_2\text{CO}_3$  melts]. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya* [Chemical Physics and Mesoscopy], 2008, vol. 10, no. 3, pp. 354-360. (In Russian).

12. Terentiev D. I., Barbin N. M., Borisenko A. V. Termodinamicheskoye modelirovaniye ispareniiya rasplavov  $\text{Pb}+\text{Bi}$  pri razlichnykh davleniyakh [Thermodynamic simulation of vaporization of  $\text{Pb}+\text{Bi}$  melts at different pressures]. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya* [Chemical Physics and Mesoscopy], 2011, vol. 13, no. 3, pp. 350-355. (In Russian).

13. Petrov V. G., Trubachev A. V. Modelirovaniye ravnovesnogo sostava faz pri osazhdenii sulfidov mysh'yaka iz reaktionnykh mass detoksikatsii l'yuizita [Modeling of equilibrium phases at sedimentation of arsenic sulfides from reactionary masses of detoxification of lewisite]. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya* [Chemical Physics and Mesoscopy], 2009, vol. 11, no. 1, pp. 35-39. (In Russian).

14. Trusov B. G. Komp'yuternoye modelirovaniye fazovykh i khimicheskikh ravnovesiy [Computer modeling of phase and chemical equilibria]. *Inzhenernyy vestnik* [Engineering Bulletin], 2012, no. 8, 8 p. 77-48211/483186. (In Russian).

15. Gurvich L. V., Veyts I. V., Medvedev V. A. i dr. Termodinamicheskie svoystva individual'nykh veshchestv. T. 1-4. [Thermodynamic properties of individual substances Vol. 1-4]. Moscow: Nauka Publ., 1978-1982.

*Поступила 12.08.2022; после доработки 28.09.2022; принята к опубликованию 04.10.2022  
Received August 12, 2022; received in revised form September 28, 2022; accepted October 04, 2022*

#### **Информация об авторах**

**Барбин Николай Михайлович**, доктор технических наук, ведущий научный сотрудник, УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Российская Федерация; ведущий научный сотрудник, УрИ ГПС МЧС России, Екатеринбург, Российская Федерация, e-mail: [NMBarbin@mail.ru](mailto:NMBarbin@mail.ru)

**Шумилова Марина Анатольевна**, кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник, УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Российская Федерация

**Гончаров Олег Юрьевич**, кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник, УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Российская Федерация

#### **Information about the authors**

**Nikolai M. Barbin**, Doct. Sci (Eng.), Leading Researcher, Udmurt Federal Research Center UB RAS, Izhevsk, Russian Federation; Leading Researcher, Ural Institute of the State Fire Service EMERCOM of Russia, Yekaterinburg, Russian Federation, e-mail: [NMBarbin@mail.ru](mailto:NMBarbin@mail.ru)

**Marina A. Shumilova**, Cand. Sci. (Chem.), Leading Researcher, Udmurt Federal Research Center UB RAS, Izhevsk, Russian Federation

**Oleg Y. Goncharov**, Cand. Sci. (Chem.), Leading Researcher, Udmurt Federal Research Center UB RAS, Izhevsk, Russian Federation