

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАСПЛАВОВ СИСТЕМЫ Al_2O_3 - SiO_2

Шорников С.И.

Центр изотопных исследований Всероссийского геологического института

им. А.П. Карпинского (ВСЕГЕИ), г. Санкт-Петербург

Sergey_Shornikov@vsegei.ru

Ключевые слова: система Al_2O_3 - SiO_2 , термодинамические свойства расплавов, теория идеальных ассоциированных растворов

Система Al_2O_3 - SiO_2 уже более ста пятидесяти лет является традиционным объектом физико-химических исследований в области геохимии, петрологии, минералогии и техники.

В настоящей работе в рамках теории идеальных ассоциированных растворов проведен расчет термодинамических свойств расплавов системы Al_2O_3 - SiO_2 в области температур 1700-2500 К. Используемая упрощенная решеточная модель [1, 2] учитывала межмолекулярные взаимодействия с помощью полуфеноменологических энергетических параметров, определенных на основе экспериментальных [3-5] и литературных [6, 7] термодинамических данных.

В отличие от расчетов, выполненных ранее в рамках квазихимической модели [8], исходные термодинамические данные учитывали 8 конденсированных (5 твердых и 3 жидких) фаз и 18 компонентов газовой фазы, перечисленных в таблице.

В этой же таблице приведены рассчитанные значения энергии Гиббса образования соединений и компонентов газовой фазы над системой Al_2O_3 - SiO_2 , используемые для нахождения условий равновесия в системе при заданном составе и температуре. Требуемое решение уравнения для общей энергии Гиббса исследуемой системы было найдено по широко применяемому в этом случае подходу – методу минимизации энергии Гиббса.

Таблица

Энергии Гиббса образования конденсированных фаз и компонентов газовой фазы над системой Al_2O_3 - SiO_2 при температуре 2300 К, рассчитанные в настоящей работе по данным [3-7]

Конденсированные фазы				Газовая фаза	
Твердые фазы	$\Delta_f G_{2300}$, кДж/моль	Жидкие фазы	$\Delta_f G_{2300}$, кДж/моль	Компоненты газовой фазы	$\Delta_f G_{2300}$, кДж/моль
Al_2O_3	-937.492	Al_2O_3	-936.202	Al	52.925
$Al_6Si_2O_{13}$	-3871.798	$Al_6Si_2O_{13}$	-3892.411	AlO	-91.574
Al_2SiO_5	-1439.027			AlO ₂	-97.395
$Al_2Si_2O_7$	-1872.724			Al ₂	154.511
SiO_2	-491.577	SiO_2	-495.065	Al ₂ O	-294.492
				Al ₂ O ₂	-374.745
				Al ₂ O ₃	-375.705
				AlSi	1230.647
				AlSiO	-226.765
				Si	133.751
				SiO	-268.189
				SiO ₂	-305.205
				Si ₂	181.835
				Si ₂ O ₂	-520.589
				Si ₃	236.819
				O	101.575
				O ₂	0.000
				O ₃	290.417

Полученные результаты представлены на рисунке в сопоставлении с экспериментальными данными, полученными масс-спектрометрическим эффузионным методом Кнудсена в интервале температур 2200-2400 К [5]. Как следует из рисунка, отклонение в рассчитанных значениях активностей оксидов не превышало 8 %, а в величинах энергий Гиббса образований расплавов системы $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ – 2 кДж/моль от экспериментальных определений, имеющих приблизительно такую же погрешность.

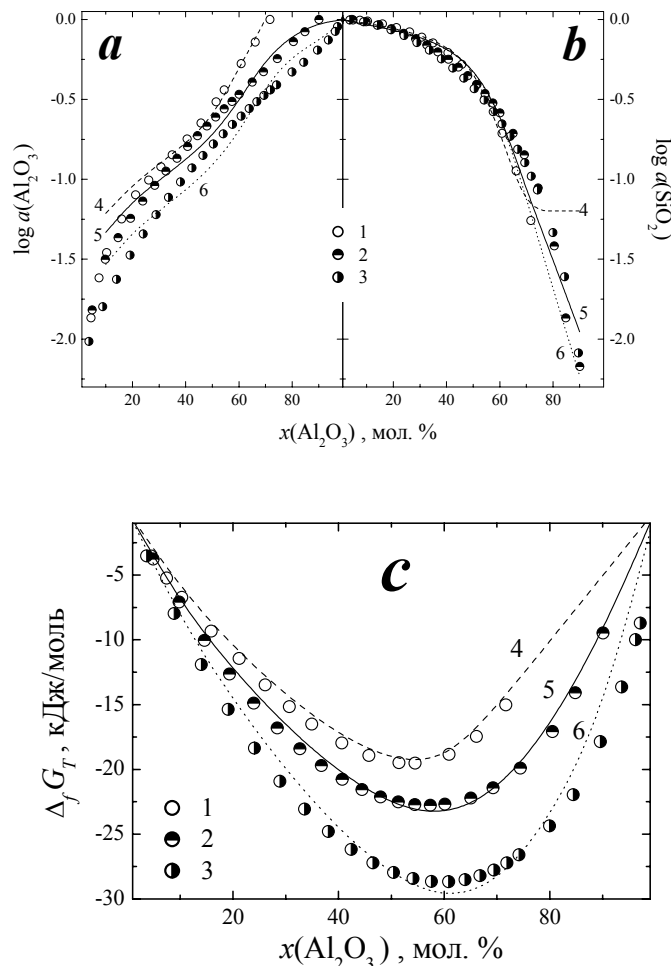


Рис. Активности Al_2O_3 (a), SiO_2 (b) и энергия Гиббса образования расплавов системы $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ (c) при температурах 2200 (1, 4), 2300 (2, 5) и 2400 К (3, 6), определенные масс-спектрометрическим методом (1-3 – в [5]) и рассчитанные в настоящей работе (4-6).

Литература

1. Шорников С.И. // Вестник Отделения наук о Земле РАН - №1(21)'2003
http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/1-2003/informbul-1/magm-11.pdf
2. Шорников С.И. // Тр. Междунар. научно-практической конф. «Наука, технология и производство силикатных материалов – настоящее и будущее». Москва: ЦПО "Информатизация образования", 2003. Т. 4. СС. 196-201.
3. Stearns C.A., Kohl F.J. // High Temp. Sci. 1973. V. 5. № 2. PP. 113-127.
4. Shornikov S.I., Stolyarova V.L., Shultz M.M. // Rapid Commun. Mass Spectr. 1994. V. 8. № 5. PP. 478-480.
5. Шорников С.И., Арчаков И.Ю. // Журн. физ. химии. 2000. Т. 74. № 5. СС. 783-788.
6. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочник // Под ред. В.П. Глушко. М.: Наука, 1978-1982. Т. 1-4.
7. Bale C.W., Chartrand P., Degterov S.A., Eriksson G., Hack K., Ben Mahfoud R., Melançon J., Pelton A.D., Petersen S. // CALPHAD. 2002. V. 26. № 2. PP. 189-228.
8. Eriksson G., Pelton A.D. // Metall. Trans. B. 1993. V. 24. № 4. PP. 807-816.

Вестник Отделения наук о Земле РАН - №1(22) 2004
Информационный бюллетень Ежегодного семинара по экспериментальной минералогии,
петрологии и геохимии 2004 года (ЕСЭМПГ-2004)
URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/1-2004/informbul-1/planet-9.pdf
Опубликовано 1 июля 2004 г.

© *Вестник Отделения наук о Земле РАН, 1997 (год основания), 2004*

При полном или частичном использовании материалов публикаций журнала,
ссылка на "Вестник Отделения наук о Земле РАН" обязательна