

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАСПЛАВОВ СИСТЕМЫ MgO-SiO₂**Шорников С.И. (ГЕОХИ РАН)***shorn@mail.wplus.net*

Ключевые слова: система MgO-SiO₂, термодинамические свойства расплавов, теория идеальных ассоциированных растворов

В настоящей работе в рамках теории идеальных ассоциированных растворов проведен расчет термодинамических свойств расплавов системы MgO-SiO₂ в области температур 1700-2300 К. Используемая упрощенная решеточная модель как и ранее для систем CaO-Al₂O₃ [1], CaO-SiO₂ [2] и Al₂O₃-SiO₂ [3] учитывала межмолекулярные взаимодействия с помощью полуфеноменологических энергетических параметров, определенных на основе экспериментальных [4] и литературных [5, 6] термодинамических данных.

В отличие от расчетов, выполненных ранее в рамках квазихимической модели [7], исходные термодинамические данные учитывали 8 конденсированных (4 твердых и 4 жидких) фаз и 11 компонентов газовой фазы, перечисленных в таблице.

В этой же таблице приведены рассчитанные значения энергии Гиббса образования соединений и компонентов газовой фазы над системой MgO-SiO₂, 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 MgO-SiO₂ при температуре 2000 К, рассчитанные в настоящей работе по данным [4-6]

Конденсированные фазы				Газовая фаза	
Твердые фазы	$\Delta_f G_{2000}$, кДж/моль	Жидкие фазы	$\Delta_f G_{2000}$, кДж/моль	Компоненты газовой фазы	$\Delta_f G_{2000}$, кДж/моль
MgO	-376.430	MgO	-349.107	Mg	-57.263
MgSiO ₃	-956.936	MgSiO ₃	-963.256	MgO	-108.759
Mg ₂ SiO ₄	-1363.087	Mg ₂ SiO ₄	-1357.504	Si	167.228
SiO ₂	-550.476	SiO ₂	-550.520	SiO	-254.769
				SiO ₂	-314.875
				Si ₂	216.304
				Si ₂ O ₂	-558.796
				Si ₃	265.892
				O	121.662
				O ₂	0.000
				O ₃	273.851

Полученные результаты представлены на рисунке в сопоставлении с экспериментальными данными, полученными масс-спектрометрическим эффузионным методом Кнудсена в интервале температур 1770-1973 К [8-10].

Как следует из рис.1, рассчитанные при температурах 1873 и 1973 К активности оксидов подтверждают наличие узкой области жидкой фазы согласно принятой диаграммы состояния системы MgO-SiO₂ и коррелируют с экспериментальными величинами. Сами экспериментальные данные довольно сильно различаются между собой, что может быть связано со значительными погрешностями их определения, составляющими, вероятно, до 20 %.

Рассчитанные значения энергии Гиббса образования магневосиликатных расплавов отличаются от экспериментальных значений на 3-4 кДж/моль, имеющих приблизительно такую же погрешность.

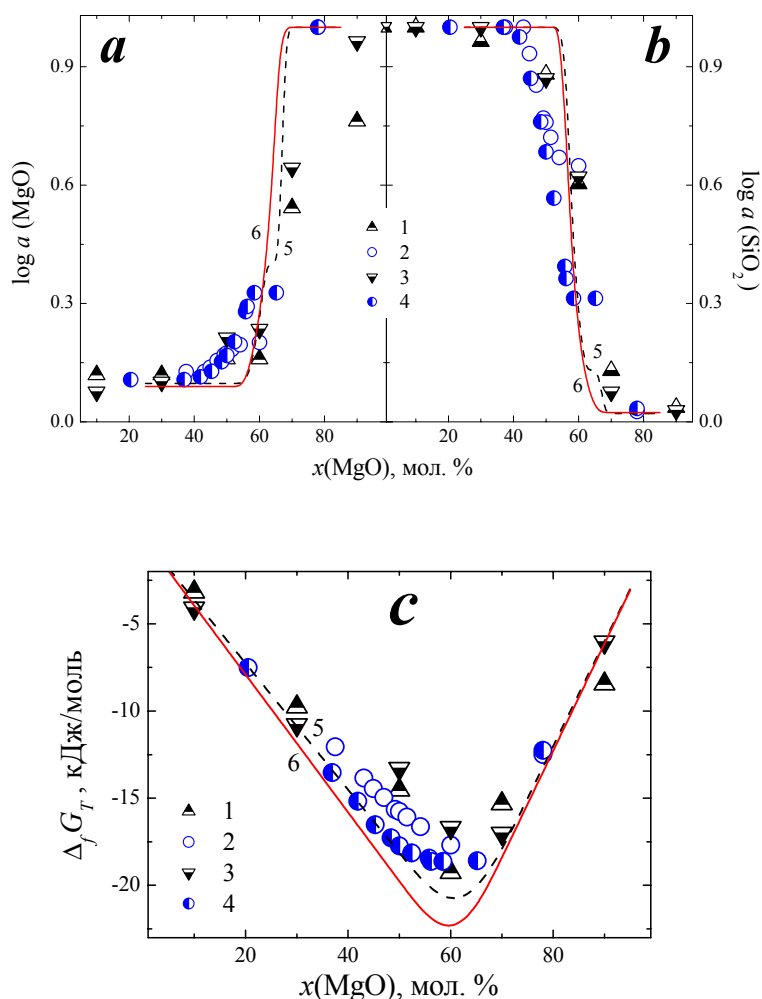


Рис.1 Активности MgO (a), SiO₂ (b) и энергия Гиббса образования магневосиликатных расплавов (c) при температурах 1770 (1), 1873 (2, 5), 1890 (3) и 1973 К (4,6), определенные масс-спектрометрическим методом (1 и 3 – в [8, 9], 2 и 4 – в [10]) и рассчитанные в настоящей работе (5, 6).

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». М.: ЦПО "Информатизация образования". 2003. Т. 4. СС. 196-201.
3. Шорников С.И. Термодинамические свойства расплавов системы Al₂O₃-SiO₂ // Вестник Отделения наук о Земле РАН №1(22)'2004.
http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/1-2004/informbul-1_2004/planet-9.pdf
4. Шорников С.И., Арчаков И.Ю., Шульц М.М. // Журн. общ. химии. 2000. Т. 70. № 3. СС. 386-398.
5. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочник. Под ред. В.П. Глушко // М.: Наука. 1978-1982. Т. 1-4.
6. Chase M.W. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1998. Monograph N.9. PP. 1-1951.
7. Deckerov S.A., Jung I.H., Pelton A.D. // J. Amer. Ceram. Soc. 2002. V. 85. N.12. PP. 2903-2910.

8. *Kambayashi S., Kato E.* // J. Chem. Thermodyn. 1983. V. 15. N.6. PP. 701-707.
 9. *Kambayashi S., Kato E.* // J. Chem. Thermodyn. 1984. V. 16. N.2. PP. 241-248.
 10. *Stolyarova V.L., Lopatin S.I., Bondar V.V.* // Dokl. Phys. Chem. 2004. V. 399. N.1. PP. 82-84.
-

Вестник Отделения наук о Земле РАН - №1(24) 2006

Информационный бюллетень Ежегодного семинара по экспериментальной минералогии, петрологии и геохимии 2004 года (ЕСЭМПГ-2006)

URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/1-2006/informbul-1_2006/term-29.pdf

Опубликовано 1 июля 2006 г

© Вестник Отделения наук о Земле РАН, 1997 (год основания), 2006

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