Электронный научно-информационный журнал «Вестник Отделения наук о Земле РАН» №1(22)′2004
URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/1-2004/informbul-1/planet-9.pdf

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 K. 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 K, 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_2O	-294.492
				Al_2O_2	-374.745
				Al_2O_3	-375.705
				AlSi	1230.647
				AlSiO	-226.765
				Si	133.751
				SiO	-268.189
				SiO_2	-305.205
				Si_2	181.835
				Si_2O_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 K [5]. Как следует из рисунка, отклонение в рассчитанных значениях активностей оксидов не превышало 8 %, а в величинах энергий Гиббса образования расплавов системы Al_2O_3-SiO_2 – 2 кДж/моль от экспериментальных определений, имеющих приблизительно такую же погрешность.

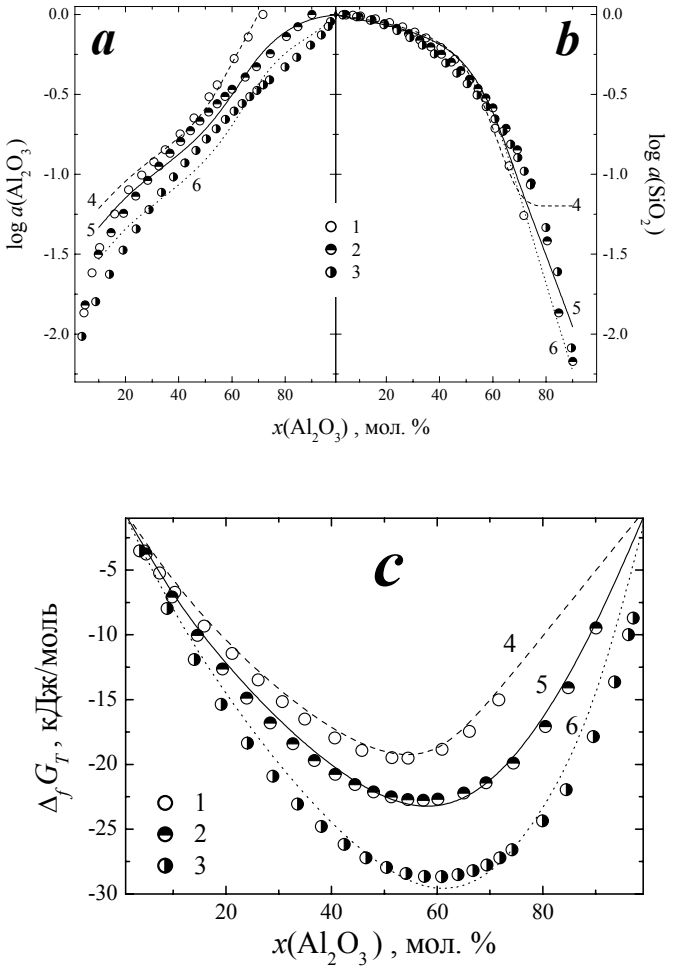

Рис. Активности Al_2O_3 (*a*), SiO_2 (*b*) и энергия Гиббса образования расплавов системы Al_2O_3-SiO_2 (*c*) при температурах 2200 (1, 4), 2300 (2, 5) и 2400 K (3, 6), определенные масс-спектрометрическим методом (1-3 – в [5]) и рассчитанные в настоящей работе (4-6).

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