

Термодинамическое моделирование фазовых равновесий в системе $\text{Na}_2\text{O} - \text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3$

© Працкова*⁺ Светлана Евгеньевна и Нечаева Евгения Сергеевна

Кафедра аналитической и физической химии. Челябинский государственный университет.

ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Россия.

Тел.: (351) 99-70-64. E-mail: se_pratskova@mail.ru.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: оксидные расплавы, обобщённая теория «регулярных» ионных растворов, активности компонентов, энергетические параметры теории.

Аннотация

Термодинамические свойства расплавов системы $\text{Na}_2\text{O} - \text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3$ представляют значительный интерес для металлургии, технологии керамических материалов, оптических волокон. Диаграммы состояния $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{Na}_2\text{O} - \text{Al}_2\text{O}_3$ изучались многими исследователями и не имеют общепринятой версии, а система $\text{Na}_2\text{O} - \text{CaO}$ специально не изучалась. В работе проведено термодинамическое моделирование фазовых равновесий системы $\text{Na}_2\text{O} - \text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3$ в рамках обобщенной теории «регулярных» ионных растворов. Выведены уравнения для активностей компонентов системы. Определены энергетические параметры модели с учетом характеристик плавления и экспериментальных данных. Построены диаграммы состояния двойных систем с использованием расчетных значений энергий Гиббса образования алюминатов натрия и кальция из соответствующих оксидов. Используя регрессионные уравнения температурных зависимостей энергетических параметров бинарных расплавов системы $\text{Na}_2\text{O} - \text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3$ рассчитаны молярные функции смешения жидкого раствора G_m^M , H_m^M , S_m^M и избыточные термодинамические функции G^E , H^E , S^E при 1500-1800 °С. Известково-глинозёмистые расплавы устойчивы при всех температурах, испытывают отрицательные отклонения от идеальности. Избыточная энергия Гиббса G^E отрицательна и по абсолютной величине изменяется в пределах 5-90 кДж/моль. С ростом концентрации Al_2O_3 в расплаве и температуры наглядно проявляется тенденция к разупорядочению: энтропия смешения расплава меняет знак с «минуса» на «плюс». Расплавы $\text{Na}_2\text{O} - \text{Al}_2\text{O}_3$ образуются с экзотермическим эффектом и упорядочением, а также являются устойчивыми. Они испытывают сильные отрицательные отклонения (по G^E) от идеальности. Однако, ситуация меняется при 55 мол. % Al_2O_3 и 1700-1800 °С расплавы системы являются неустойчивыми.