

Модель фазового комплекса трехкомпонентной взаимной системы $\text{Na}^+, \text{Sr}^{2+} || \text{WO}_4^{2-}, \text{MoO}_4^{2-}$

© Бурчаков*⁺ Александр Владимирович, Гаркушин Иван Кириллович, Милов Сергей Николаевич и Калинина Ирина Петровна

Самарский государственный технический университет. ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Россия. E-mail: turnik27@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: компьютерная модель, 3D модель, КОМПАС-3D, фазовый комплекс, трехкомпонентная взаимная система, вольфраматы, молибдаты, непрерывные ряды твердых растворов, фазовые равновесия, кристаллизующиеся фазы, моновариантное равновесие.

Аннотация

В работе представлены результаты теоретического изучения фазового комплекса трехкомпонентной взаимной системы, состоящей из вольфраматов и молибдатов натрия и стронция. Предварительно был проведен обзор литературы по данным о фазовых равновесиях в конденсированном состоянии индивидуальных солей, двойных ограничивающих системах. В двух двойных системах $\text{Na}_2\text{MoO}_4\text{--SrMoO}_4$ и $\text{Na}_2\text{WO}_4\text{--SrWO}_4$ наблюдается эвтектическое равновесие с образованием твердых фаз, отвечающих компонентам системы, а в двух других ограничивающих двойных системах $\text{Na}_2\text{MoO}_4\text{--Na}_2\text{WO}_4$ и $\text{SrMoO}_4\text{--SrWO}_4$ кристаллизуется одна фаза непрерывного ряда твердых растворов. На основе математической модели мольного баланса можно однозначно определить количества продуктов реакции, молекулярные формулы твердых растворов и уравнения химических реакций для произвольной смеси компонентов системы. Данная модель представляет совокупность алгебраических уравнений, по которым производится расчет баланса. Для построения компьютерной 3D модели в работе приведены уравнения пересчета координат из барицентрических в декартовы. Модель реализована в концентрационно-температурных координатах программе КОМПАС-3D с использованием экспериментальных данных о системе. Модель построена в двух интерпретациях: на основе данных об элементах ограничения и на основе всех имеющихся данных о системе. Сравнение двух моделей дает возможность оценить прогностическую способность, осуществляемую при помощи 3D моделирования. Из данного сравнения выяснилось, что с помощью 3D модели можно проводить предварительный априорный прогноз фазовых равновесий с целью выявления строения фазовых диаграмм на качественном и количественном уровнях. Проекция политермы кристаллизации на квадрат составов представлена двумя полями твердых растворов – $\text{Na}_2\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{O}_4$ и $\text{SrMo}_x\text{W}_{1-x}\text{O}_4$. Построены изотермические и политермические разрезы. В системе реализуются ди- и моновариантные равновесия.