

Прогнозирование фазовых равновесий в системе $\text{NaCl-Na}_2\text{MoO}_4\text{-Na}_2\text{WO}_4$ на границе «жидкость-твердое тело»

© Бурчаков*⁺ Александр Владимирович, Гаркушин Иван Кириллович,
Милов Сергей Николаевич и Сухаренко Мария Александровна

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 система, вольфраматы, молибдаты, хлориды, непрерывные ряды твердых растворов, фазовые равновесия, кристаллизующиеся фазы, моновариантное равновесие.

Аннотация

В работе представлены результаты теоретического изучения фазового комплекса трехкомпонентной системы, состоящей из вольфрамата, молибдата и хлоридов натрия для равновесия «жидкость – твердое тело». Предварительно был проведен обзор литературы по данным о фазовых равновесиях в конденсированном состоянии индивидуальных солей, двойных ограничивающих систем. В двух двойных системах $\text{NaCl-Na}_2\text{MoO}_4$ и $\text{NaCl-Na}_2\text{WO}_4$ наблюдается эвтетическое равновесие с образованием твердых фаз, отвечающих компонентам системы и образующимся соединениям $\text{Na}_3\text{ClMoO}_4$ и Na_3ClWO_4 , а в ограничивающей двойной системе $\text{Na}_2\text{MoO}_4\text{-Na}_2\text{WO}_4$ 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 тройной системы в работе приведены уравнения пересчета координат из барицентрических в декартовые. Модель реализована в концентрационно-температурных координатах программы КОМПАС-3D с использованием экспериментальных данных об ограничивающих элементах системы. С помощью 3D модели можно проводить предварительный априорный прогноз фазовых равновесий с целью выявления строения фазовых диаграмм на качественном и количественном уровнях. Проекция поверхности ликвидуса на треугольник составов представлена тремя полями кристаллизации – NaCl , $\text{Na}_3\text{ClMo}_x\text{W}_{1-x}\text{O}_4$ и $\text{Na}_2\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{O}_4$. Построены изотермические и политермические разрезы. В системе реализуются ди- и моновариантные равновесия. Построена диаграмма материального баланса кристаллизующихся фаз. В работе приведен расчет соотношения равновесных фаз, а также качественный и количественный состав их для двухфазной и трехфазной области по координатам точек – вершин коннодных отрезков и коннодных треугольников, которые извлечены из 3D модели. Расчет реализован для заданного состава и температуры точки.