

Термодинамическое и экспериментальное моделирование взаимодействий в системе Ta-ZnS

© Удоева^{1*} Людмила Юрьевна, Агафонов¹⁺ Сергей Николаевич
и Петрова² Софья Александровна

¹Лаборатория пирометаллургии цветных металлов. ²Лаборатория физической химии металлургических расплавов. Институт металлургии УрО РАН.
ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Свердловская область. Россия.
Тел.: (343) 232-90-18. E-mail: lyuid@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: тантал, сульфид цинка, сульфидирование, термодинамическое моделирование, фазообразование.

Аннотация

В статье представлены результаты исследований, направленных на оценку возможности сульфидирования металлического тантала сульфидом цинка в инертной атмосфере. Для теоретического обоснования возможности процесса взаимодействия использовали программный пакет HSC 6.12 Chemistry (Outotec), который позволяет прогнозировать равновесный состав продуктов взаимодействия. Рассчитана энергия Гиббса для возможных реакций в системе ZnS – Ta, определены оптимальные условия полного превращения металлического тантала в дисульфид TaS₂ – стехиометрическое соотношения реагентов и температурный режим процесса, обеспечивающий взаимодействие тантала с газообразным сульфидом цинка или продуктами его диссоциации. Экспериментальные исследования проведены в трубчатой печи в токе инертного газа (гелий), подаваемого по замкнутому контуру алундового реактора. Спрессованные в таблетки компоненты с различным мольным отношением выдерживали в течение 90 мин при температуре 1300 °С. Установлено, что при мольном отношении ZnS/Ta равном 2.0, соответствующем стехиометрии реакции образования дисульфида тантала, продукт сульфидирования содержит TaS₂ двух модификаций (гексагональной и тригональной сингонии) и Ta₅S₈ (14.1%). В случае дефицита сульфидизатора образуются только его низшие сульфиды (Ta_{1,23}S₂, Ta_{3,1}S₆, TaS_(y)), которые являются промежуточными фазами в цепи превращений тантала в TaS₂. Идентификация фаз и оценка их доли в продукте сульфидирования выполнены с применением полнопрофильного анализа дифрактограмм по методу Ритвельда. В условиях проведенных опытов не выявлено формирование сложных сульфидов типа Zn_xTaS₂, образование которых возможно в результате интерколяции цинка между слоями основной структуры кристаллической решетки дисульфида тантала.