

Кристаллизующиеся фазы и химическое взаимодействие в системе K^+ , $Ca^{2+} \parallel F^-, Cl^-$

© Гаркушин*⁺ Иван Кириллович, Лаврентьева Ольга Владимировна, Афанасьева Ольга Юрьевна

Кафедра «Общая и неорганическая химия». Самарский государственный технический университет. ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Россия.

Тел.: +7 (846) 278-44-77. E-mail: gik49@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: тройная система, хлориды и фториды, древо фаз, кристаллизующиеся фазы, стабильные и нестабильные секущие, химическое взаимодействие.

Аннотация

Исследование посвящено моделированию древа фаз тройной взаимной системы, состоящей из фторидов и хлоридов калия и кальция K^+ , $Ca^{2+} \parallel F^-, Cl^-$, и описанию химического взаимодействия. Построено линейное древо фаз, включающее пять вторичных фазовых треугольников. Фазовые треугольники связаны между собой четырьмя стабильными секущими, из которых одна – стабильная диагональ $KCl-CaF_2$ и три – адиагонали $KCl-KCaF_3$, $KCl-CaF_2 \cdot CaCl_2$ и $CaF_2 \cdot CaCl_2-KCaCl_3$. В разбиении участвуют два двойных соединения конгруэнтного плавления – $KCaF_3$ и $KCaCl_3$ и одно соединение инконгруэнтного плавления – $CaF_2 \cdot CaCl_2$. Во вторичных треугольниках кристаллизуются фазы, отвечают солям, расположенным в вершинах вторичных треугольников. Четырем указанным стабильным секущим отвечает семь нестабильных секущих. Для смесей, отвечающих точкам пересечения стабильных и нестабильных секущих (точки эквивалентности) описано химическое взаимодействие на основе термодинамических расчетов тепловых эффектов и энергий Гиббса реакций для стандартных условий. Всего отмечено точек эквивалентности 14: на стабильной секущей $KCl-KCaF_3$ – три, на стабильной диагонали $KCl-CaF_2$ – пять, на стабильной секущей $KCl-CaF_2 \cdot CaCl_2$ – четыре, на стабильной секущей $CaF_2 \cdot CaCl_2-KCaCl_3$ – две. Описано химическое взаимодействие для произвольно выбранных смесей от двух до семи солей методом ионного баланса, сущность которого заключается в уравнивании коэффициентов при веществах в левой и правой частях уравнений реакций при переборе симплексов. Во всех реакциях смеси после расплавления и кристаллизации включают три соли, а в одной реакции смесь после кристаллизации из расплава принадлежит стабильной секущей. Направление взаимодействия в химических реакциях подтверждено термодинамическими расчетами энтальпий и энергий Гиббса. Брутто-реакции в смесях можно разложить на более простые.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Гаркушин И.К., Лаврентьева О.В., Афанасьева О.Ю. Кристаллизующиеся фазы и химическое взаимодействие в системе K^+ , $Ca^{2+} \parallel F^-, Cl^-$. *Бутлеровские сообщения*. 2023. Т.74. №4. С.57-64. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-74-4-57

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Гаркушин И.К., Лаврентьева О.В., Афанасьева О.Ю. Кристаллизующиеся фазы и химическое взаимодействие в системе K^+ , $Ca^{2+} \parallel F^-, Cl^-$. *Бутлеровские сообщения В*. 2023. Vol.5. No.2. Id.2. DOI: 10.37952/ROI-jbc-RB/23-5-2-2