

ІМОВІРНА ОЦІНКА ФАЗОУТВОРЕНЬ В СИСТЕМІ



Шабанова Г.М.¹, Мокрицька В.К.², Проскурня О.М.¹, Цапко Н.С.¹

¹Національний технічний університет

«Харківський політехнічний інститут», м. Харків;

²Харківська державна академія міського господарства, м. Харків

У хімії силікатів система $\text{BaO} - \text{ZrO}_2 - \text{SiO}_2$ становить інтерес, як в теоретичному відношенні, так і для розробки вогнетривких в'язучих із заданими експлуатаційними характеристиками. До теперішнього часу ця система практично не вивчалася.

Досить докладно досліджені субсолідусні області подвійних систем, що входять в систему $\text{BaO} - \text{ZrO}_2 - \text{SiO}_2$. Чухланцевим В.Г. та Галкіним Ю.М. проведена триангуляція системи на основі якісного хімічного аналізу. У роботі були уточнені склади і наявність деяких потрійних сполук, а саме $\text{Ba}_2\text{Zr}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$ та $\text{BaZrSi}_3\text{O}_9$. Ці сполуки взаємно стійкі. Наявність цирконосиліката BaZrSiO_5 в системі не підтверджується.

У картотеку рентгенографічних даних внесені тільки цирконосилікати $\text{Ba}_2\text{Zr}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$ та $\text{BaZrSi}_3\text{O}_9$. Термодинамічні розрахунки реакцій фазоутворення в системі не проводилися. Сполука $\text{Ba}_2\text{Zr}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$ плавиться інконгруентно при температурі 1450 °С. Обидва цирконосилікати стійкі на повітрі і з водою практично не реагують.

З моменту останніх досліджень, по коноді $\text{BaO} - \text{SiO}_2$ були встановлені ще дві бінарні сполуки – $\text{Ba}_5\text{Si}_8\text{O}_{21}$ та $\text{Ba}_3\text{Si}_5\text{O}_{13}$. Таким чином, вивчення субсолідусної будови системи $\text{BaO} - \text{ZrO}_2 - \text{SiO}_2$, що включає 2 потрійних та 9 бінарних сполук, вимагає додаткових досліджень.

З цією метою були проведені термодинамічні розрахунки, які визначили рівноваги і стабільність бінарних та трифазних комбінацій в субсолідусній області системи $\text{BaO} - \text{ZrO}_2 - \text{SiO}_2$.

Через відсутність термодинамічних характеристик для потрійних цирконосилікатів, фазові рівноваги моделювалися твердофазними реакціями за участю тільки бінарних оксидів.

Розрахунки проводилися за методикою, що враховує інтегральні вклади змін теплоємності (C_p) в змінення ентальпії утворення сполук з елементів (ΔH°_T) та ентропії утворення сполук з елементів (ΔS°_T).

Результати розрахунків однозначно триангулюють систему $\text{BaO} - \text{ZrO}_2 - \text{SiO}_2$ (без урахування потрійних з'єднань) та мають інформаційну цінність для прогнозування високотемпературних процесів, що протікають при синтезі цементного клінкеру с заданим фазовим складом.