

ТЕРМОДИНАМІКА СПІВІСНУВАННЯ ФАЗ У СИСТЕМІ $\text{CaO-BaO-Cr}_2\text{O}_3$

Грудина Є.Б., Корогодська А.М., Шабанова Г.М., Волобуєв М.М.

*Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут», м. Харків*

Ядерну енергію можна генерувати за допомогою реакцій синтезу або поділу субатомних частинок, що призводить до утворення великої кількості теплоти, яка використовується для виробництва електроенергії. Ядерні реактори вважаються екологічною альтернативою звичайним електростанціям, що працюють на викопному паливі, але при їх експлуатації виникає ризик ядерного опромінення навколишнього середовища. Одним із методів запобігання ядерному опроміненню є створення захисних оболонок реакторів, для чого останнім часом безальтернативно використовується спеціальний бетон. Він має низку переваг, включаючи обмежену пористість для збереження сталевих арматур, стійкість до навантажень та термостійкість, доступність ресурсів для виробництва та можливість виготовлення будь-яких форм.

Основою бетону традиційно є цемент, надання якому спеціальних властивостей неможливе без дослідження складних оксидних систем, які є базою для розробки його складів. Для модифікації глиноземистого цементу та надання йому підвищеної захисної здатності та вогнетривкості придатними є композиції системи $\text{CaO-BaO-Al}_2\text{O}_3\text{-Cr}_2\text{O}_3$. До її складу входить трикомпонентна система $\text{CaO-BaO-Cr}_2\text{O}_3$, повної субослідусної будови якої у доступних джерелах не знайдено. Це обумовлює необхідність термодинамічного та геометро-топологічного аналізу даної системи.

За даними різних авторів у системі $\text{CaO-BaO-Cr}_2\text{O}_3$ у досліджуваному інтервалі температур 800 – 2000 К, існують наступні термодинамічно стійкі бінарні сполуки: CaCr_2O_4 , BaCr_2O_4 , $\text{Ba}_3\text{Cr}_2\text{O}_6$, що дозволить дослідити розглянуту трикомпонентну систему в повному обсязі. Аналіз ймовірності співіснування фаз системи $\text{CaO-BaO-Cr}_2\text{O}_3$ заснований на зміні величини вільної енергії Гіббса від температури відповідних реакцій, що враховує зміну теплоємності сполук від температури. Для встановлення ймовірних пар співіснуючих фаз були розраховані значення зміни величини вільної енергії Гіббса для всіх можливих обмінних реакцій, що перебігають у системі. Аналіз отриманих результатів заперечує співіснування єдиного стійкого хроміту кальцію з оксидом барію на користь співіснування хромітів барію з оксидом кальцію. При цьому дослідження зворотної реакції показує, що існування трикутника $\text{CaO-BaCr}_2\text{O}_4\text{-Ba}_3\text{Cr}_2\text{O}_6$ є більш вигідним у термодинамічному відношенні у порівнянні з бінарними комбінаціями фаз. Усі розраховані реакції не є знакозмінними, що обумовлює стійке співіснування вказаних фаз в усьому розрахунковому температурному інтервалі. За геометро-топологічної необхідності наявним є також співіснування фаз CaCr_2O_4 та BaCr_2O_4 .

Таким чином, у результаті проведених термодинамічних та геометро-топологічних розрахунків встановлено спрямованість перебігу взаємних твердофазних реакцій у трикомпонентній системі $\text{CaO-BaO-Cr}_2\text{O}_3$ за участю стабільно існуючих сполук та визначено основні коноди зазначеної системи.