

РОЗРАХУНОК ТЕРМОДИНАМІЧНИХ КОНСТАНТ СТРОНЦІЄВОГО ПОЛЬОВОГО ШПАТУ

Захаров А.В., Кривобок Р.В., Лісачук Г.В., Федоренко О.Ю. Рябінін О.С.
Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут», м. Харків

Основою для створення високотемпературних радіопрозорих керамічних матеріалів для ракетної та космічної техніки є трикомпонентні оксидні системи $RO-Al_2O_3-SiO_2$, де R – Mg, Sr, Ba. Радіопрозору кераміку в системі $SrO-Al_2O_3-SiO_2$ створюють на основі стронцієвого польового шпату ($SrAl_2Si_2O_8$) – потрійна сполука даної системи володіє необхідними електрофізичними властивостями. Інформація, що до синтезу $SrAl_2Si_2O_8$ обмежена, існуючі роботи не дають повного уявлення про умови термодинамічної ймовірності її утворення.

Для прогнозування можливості утворення $SrAl_2Si_2O_8$ шляхом твердофазових реакцій, використовували термодинамічний аналіз, що дозволяє скоротити (в деяких випадках повністю виключити) експериментальні дослідження за рахунок використання комплексу розрахункових методів. Оскільки у довідковій літературі не виявлено значення вихідних термодинамічних констант для $SrAl_2Si_2O_8$, нами проведені розрахунки термодинамічних констант цієї сполуки (ентальпії, ентропії, рівняння теплоємності).

При розрахунку ентальпії використовувалася методика утворення подвійних і потрійних сполук, яка враховує середню грам-атомну ентальпію утворення сполук даної потрійної системи запропонованої Тараненковою В.В. Розрахунки стандартних ентропій проводилися згідно напівемпіричних формул Істмена і Яцимирського, а також за формулами Вуда і Фрейзера. Згідно з методом, розробленим Ландієм Н.А., було визначено рівняння залежності теплоємності від температури $C_p=f(T)$. Розрахунок проводився за схемою, згідно з якою сполука $SrAl_2Si_2O_8$ є складною кисневою сполукою, яка складається з твердих оксидів, плавиться конгруентно (без розкладання) та має поліморфне перетворення при 758 °С.

В результаті досліджень визначені термодинамічні константи сполуки $SrAl_2Si_2O_8$ (табл.1).

Таблиця 1 – Термодинамічні константи

Соединение	$-\Delta H_{298}^{\circ}$, кДж/моль	S_{298}° , Дж/(моль·К)	$C_p=a+bT+cT^{-2}$, Дж/(моль·К)			Интервал температур, К
			a	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^{-5}$	
$SrAl_2Si_2O_8$	4235,79	199,12	49,82	31,76	-	298 – 1031
			65,74	12,24	-	1031 – 1927

Подальші дослідження спрямовані на визначення оптимальних сировинних композицій з точки зору утворення стронцієвого анортиту шляхом розрахунку енергії Гіббса реакцій.