

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Ордена Трудового Красного Знамени
Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова
Российской академии наук

ВТОРОЙ МЕЖДУНАРОДНЫЙ СИМПОЗИУМ «ХИМИЯ ДЛЯ БИОЛОГИИ, МЕДИЦИНЫ, ЭКОЛОГИИ И СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА»

Посвящается 100-летию со дня рождения
академика М.Г. Воронкова



II INTERNATIONAL SYMPOSIUM
ISCHEM 2021

Сборник тезисов докладов

г. Санкт-Петербург
6 - 8 декабря 2021 г.



**ФГБУН Ордена Трудового Красного Знамени
Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова
Российской академии наук (ИХС РАН)**

Спонсоры симпозиума



АО «ОПТЭК»



ООО «НПП «СПЕКТР»



ООО «СокТрейд Ко»



ООО «Праймлаб»

*Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Отделение химии и наук о материалах РАН
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Ордена Трудового Красного Знамени Институт химии силикатов
им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук (ИХС РАН)*

**ВТОРОЙ МЕЖДУНАРОДНЫЙ СИМПОЗИУМ
«ХИМИЯ ДЛЯ БИОЛОГИИ, МЕДИЦИНЫ,
ЭКОЛОГИИ И СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА»
ISCHEM 2021**

Посвящается 100-летию со дня рождения
академика М.Г. Воронкова



Сборник тезисов докладов

6–8 декабря 2021 г.
г. Санкт-Петербург

УДК 54
ББК 24
X46

Второй международный симпозиум «Химия для биологии, медицины, экологии и сельского хозяйства», посвященный 100-летию со дня рождения академика М.Г. Воронкова: Сборник тезисов докладов, г. Санкт-Петербург, 6–8 декабря 2021 г. – СПб: ООО «Издательство «ЛЕМА», 2021. – 190 с.

ISBN 978-5-00105-672-0

Издание осуществлено с оригинала, подготовленного Институтом химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук на основе MS Word файлов, представленных авторами докладов. Техническое редактирование касалось только ошибок, обусловленных дефектами подготовки исходных файлов.

© Коллектив авторов, 2021
© ООО «Издательство «ЛЕМА», 2021

4. Морачевский А.Г., Воронин Г.Ф., Гейдерих В.А., Куценок И.Б. Электрохимические методы в термодинамике металлических систем. М.: ИКЦ «Академкнига». 2003. 334 с.
5. Barker J.A. Cooperative orientation effects in solutions // J. Chem. Phys. 1952. V. 20. № 10. P. 1526–1532.

РАСЧЁТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ РАВНОВЕСИЙ В СИСТЕМЕ $TiO_2-Al_2O_3-SiO_2$

**Ворожцов В.А.^{1,2}, Шемчук Д.В.², Альмяшев В.И.^{2,3,4}, Шилов А.Л.²,
Лопатин С.И.^{1,2}, Столярова В.Л.^{1,2}**

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

²Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

³Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»
им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

⁴Научно-исследовательский технологический институт им. А.П. Александрова,
Сосновый Бор, Россия

Стекла и стеклокристаллические материалы на основе системы $TiO_2-Al_2O_3-SiO_2$ обладают набором перспективных физико-химических характеристик, таких как низкие коэффициенты расширения, высокие показатели преломления и люминесцентные свойства [1]. Для разработки методов синтеза и эксплуатации указанных материалов необходимо получение информации о термодинамических свойствах и фазовых равновесиях в системе $TiO_2-Al_2O_3-SiO_2$, а также выбор модельных подходов для корректного описания получаемых экспериментально физико-химических свойств и прогнозирования важных для практического применения параметров.

В настоящей работе выполнен расчёт температуры ликвидуса в системе $TiO_2-Al_2O_3-SiO_2$ с использованием оригинальной методики [2] по данным о равновесиях в соответствующих бинарных системах. Полученные результаты являются основой для выявления концентрационных и температурных интервалов для дальнейшего экспериментального изучения поверхности ликвидуса в данной системе. Расчёт фазовых равновесий в системе $TiO_2-Al_2O_3-SiO_2$ также включал попытку оценки области стеклообразования методом, предложенным ранее Школьниковым [3]. Найденные величины были сопоставлены с экспериментальными данными по синтезу стёкол в исследуемой системе в молибденовых тиглях при температуре 2273 К в атмосфере аргона.

Избыточные энергии Гиббса и активности компонентов в системе $TiO_2-Al_2O_3-SiO_2$ рассчитаны полуэмпирическими методами Колера, Туа, Редлиха-Кистера и Вильсона [4] по данным в бинарных системах при температуре 2373 К. Термодинамические свойства бинарных систем, необходимые для расчёта, были определены ранее экспериментально методом высокотемпературной масс-спектрометрии. Рассчитанные величины в системе $TiO_2-Al_2O_3-SiO_2$ были сопоставлены с экспериментальными данными, полученными масс-спектрометрическим эффузионным методом Кнудсена и оптимизированными также в рамках обобщённой решёточной теории ассоциированных растворов [5]. Проведённое сопоставление позволило показать преимущества полуэмпирического метода Вильсона для расчёта термодинамических свойств стёкол и расплавов системы $TiO_2-Al_2O_3-SiO_2$ в концентрационных диапазонах, удалённых от соответствующих бинарных систем.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и КН РА в рамках научного проекта № 20-53-05013.

1. Schultz P.C., Dumbaugh W.H. Silica-rich glasses in the $TiO_2-Al_2O_3-SiO_2$ system // J. Non Cryst. Solids. 1980. Т. 38. №. 1. С. 33-37.
2. Ворожцов В.А., Столярова В.Л. Полуэмпирические методы расчета температур ликвидуса в оксидных системах // Журн. тех. физ. 2021. Т. 91. № 6. С. 902–912.
3. Школьников Е.В. К определению стеклообразующей способности неорганических расплавов // Физ. хим. стекла. 1985. Т. 11. № 4. С. 501-503.
4. Морачевский А.Г., Воронин Г.Ф., Гейдерих В.А., Куценок И.Б. Электрохимические методы в термодинамике металлических систем. М.: ИКЦ «Академкнига». 2003. 334 с.
5. Barker J.A. Cooperative orientation effects in solutions // J. Chem. Phys. 1952. V. 20. № 10. P. 1526–1532.