

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РАН  
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЁРДОГО ТЕЛА УРО РАН  
ИНСТИТУТ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ  
ИМ. А.В. НИКОЛАЕВА СО РАН

**ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
«ХИМИЯ ТВЁРДОГО ТЕЛА И  
ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ - 2022»  
И  
XIV Симпозиум «ТЕРМОДИНАМИКА И  
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ»**

10-13 октября 2022 г.

Екатеринбург • 2022

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РАН  
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЁРДОГО ТЕЛА УРО РАН  
ИНСТИТУТ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ  
ИМ. А.В. НИКОЛАЕВА СО РАН

ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
«ХИМИЯ ТВЁРДОГО ТЕЛА И  
ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ - 2022»  
и  
XIV Симпозиум «ТЕРМОДИНАМИКА И  
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ»

10-13 октября 2022 г.

г. Екатеринбург  
2022 год

УДК 544.2:544.3:546.05

*Редакционная коллегия:*

*М.В. Кузнецов, А.Н. Еняшин, Е.В. Поляков,  
Т.А. Денисова, Е.А. Богданова, В.Л. Кожевников*

*Рецензенты:*

*член-корреспондент РАН, профессор В.Г. Бамбуров,  
д.х.н. О.В. Бушкова, д.х.н. В.Н. Красильников*

**ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ - 2022» И XIV СИМПОЗИУМ «ТЕРМОДИНАМИКА И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ». - материалы XII-й Всероссийской конференции/Екатеринбург. - ИХТТ УрО РАН. Издательство «ДжиЛайм» ООО - 2022. – 452 с.**

Сборник трудов содержит представительную выборку результатов отечественных исследований последних лет в области химии твёрдого тела, синтеза и физикохимии функциональных материалов. Тематический круг рассмотренных вопросов включает химические проблемы материалов для получения и преобразования энергии, синтез неорганических функциональных материалов, методы моделирования свойств функциональных материалов. В сборнике отражены итоги традиционного XIV Симпозиума «Термодинамика и материаловедение» по направлениям: синтез и аттестация перспективных веществ и материалов; фазовые равновесия; приборы и техника термодинамических исследований. Приведённые материалы адресованы учёным – специалистам в области химии и наук о материалах, инженерам, аспирантам и студентам университетов химического профиля, инженерно-техническим работникам химико-металлургического, энергетического и ядерно-химического профиля.

\*

*Конференции по химии твёрдого тела ведут своё начало с декабря 1973 года - даты проведения конференции молодых учёных и специалистов СССР «Физика и химия твёрдого тела» в г.Свердловске (ныне г.Екатеринбурге). Настоящая конференция является 12-й по этому направлению и приурочена к 90-летию со дня основания Института химии твёрдого тела Уральского отделения Российской академии наук.*

ISBN 978-5-905545-32-0

© ИХТТ УрО РАН  
© М.В. Кузнецов

### **Программный комитет:**

Альмяшева О.В., д.х.н. СПбГЭТУ "ЛЭТИ" (Санкт-Петербург)  
Бамбуров В.Г., чл.-корр. РАН, ИХТТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Бушкова О.В., д.х.н., ИХТТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Васильева И.В., д.х.н., ИНХ СО РАН (Новосибирск)  
Гельфонд Н.В., д.х.н., ИНХ СО РАН (Новосибирск)  
Денисова Т.А., д.х.н. ИХТТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Дерябина А.В., к.и.н., ИХТТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Еняшин А.Н., к.х.н., ИХТТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Леонидов И.А., к.х.н., ИХТТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Марков В.Ф., д.х.н., УрФУ (Екатеринбург)  
Ремпель А.А., академик, ИМЕТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Титова С.Г., д.х.н., ИМЕТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Черепанов В.А., д.х.н., УрФУ (Екатеринбург)

### **Состав организационного комитета:**

Альмяшева О.В., СПбГЭТУ "ЛЭТИ", д.х.н.  
Бамбуров В.Г., ИХТТ УрО РАН, чл.-корр. РАН  
Болдырев В.В., ИХКГ СО РАН, академик  
Бушкова О.В., ИХТТ УрО РАН, д.х.н.  
Гавричев К.С., ИОНХ РАН, д.х.н.  
Гнеденков С.В., ИХ ДВО РАН, чл.-корр. РАН  
Гудилин Е.А., МГУ, чл.-корр. РАН  
Гусаров В.В., ФТИ им. А.Ф. Иоффе, чл.-корр. РАН  
Дыбцев Д.Н., ИНХ СО РАН, д.х.н.  
Зайков Ю.П., ИВТЭ УрО РАН, д.х.н.  
Зверева И.А., СПбГУ, д.х.н.  
Морозова Н.Б., ИНХ СО РАН, д.х.н.  
Наумов Н.Г., ИНХ СО РАН, д.х.н.  
Немудрый А.П., ИХТТМ СО РАН, чл.-корр. РАН  
Окотруб А.В., ИНХ СО РАН, д.ф.-м.н.  
Ремпель А.А., ИМЕТ УрО РАН, академик  
Русанов А.И., СПбГУ, академик  
Станкус С.В., ИТ СО РАН, д.ф.-м.н.  
Столярова В.Л., СПбГУ, чл.-корр. РАН  
Тойка А.М., СПбГУ, д.х.н.  
Успенская И.А., МГУ, д.х.н.  
Федин В.П., ИНХ СО РАН, чл.-корр. РАН  
Хайкина Е.Г., БИП СО РАН, д.х.н.  
Шевченко В.Я., ИХС РАН, академик  
Шубин Ю.В., ИНХ СО РАН, д.х.н.  
Ярославцев А.Б., ИОНХ РАН, академик

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ В СИСТЕМЕ $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-ZrO}_2$ НА ОСНОВЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОДХОДА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БАЗЫ ДАННЫХ NUCLEA

Т.В. Соколова<sup>1</sup>, Д.А. Юрченко<sup>1</sup>, В.И. Альмяшев<sup>1,2,3</sup>, В.Л. Столярова<sup>1,4</sup>,  
В.А. Ворожцов<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>*ИХС РАН, наб. Адм. Макарова, 2, Санкт-Петербург, 199034*

<sup>2</sup>*НИТИ, Копорское шоссе, 72, Ленинградская обл., 188540*

<sup>3</sup>*СПбГЭТУ «ЛЭТИ», ул. Проф. Попова, 5Ф, Санкт-Петербург, 197022*

<sup>4</sup>*СПбГУ, Университетская наб., 7-9, Санкт-Петербург, 199034*

Система  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-ZrO}_2$  является основой для широкого спектра керамических, стеклообразных и стеклокристаллических материалов, перспективных в различных областях современного материаловедения. Особый интерес представляет получение на основе рассматриваемой системы биологически совместимой керамики для стоматологии и медицинских применений [1], материалов для оптической промышленности и технологии огнеупоров [2], а также протекторных покрытий для высокотемпературных технологий [3, 4].

Однако противоречия в имеющейся информации о фазовых равновесиях в системе  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-ZrO}_2$  не позволяют однозначно планировать условия синтеза и применения, а также прогнозировать физико-химические характеристики получаемых материалов на основе указанной системы. В связи с этим в настоящей работе рассмотрены известные данные о фазовых равновесиях в системе  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-ZrO}_2$  и проведён расчёт сечений её фазовой диаграммы для восполнения пробелов и разрешения противоречий, возникающих при описании высокотемпературных равновесий в рассматриваемой системе.

Фазовые равновесия в системе  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-ZrO}_2$  рассчитаны на основе термодинамического подхода с использованием базы данных NUCLEA и минимизатора энергии Гиббса GEMINI2 [5]. Часть рассчитанных изотермических сечений фазовой диаграммы рассматриваемой системы при температурах 400.15-2550.15 К была приведена ранее [6]. В настоящей работе обсуждаются не опубликованные в исследовании [6] изотермические сечения, а также изоплеты, рассчитанные до температуры 3000 К, как показано на Рис. 1.

На диаграмме состояния системы  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-ZrO}_2$  наблюдались одно-, двух- и трёхфазные поля фазовых равновесий с участием индивидуальных оксидов, соединений бинарных систем: муллита и циркона, а также расплава. Следует отметить, что в базе данных

NUCLEA соединения, входящие в состав системы  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-ZrO}_2$ , рассматриваются как стехиометрические с нулевой областью гомогенности. Особое внимание при расчёте было уделено выявлению особенностей поверхности ликвидуса изучаемой системы, включая температуры существования равновесий с участием расплава, координаты эвтектических точек и протяжённость области жидкофазного расслаивания.

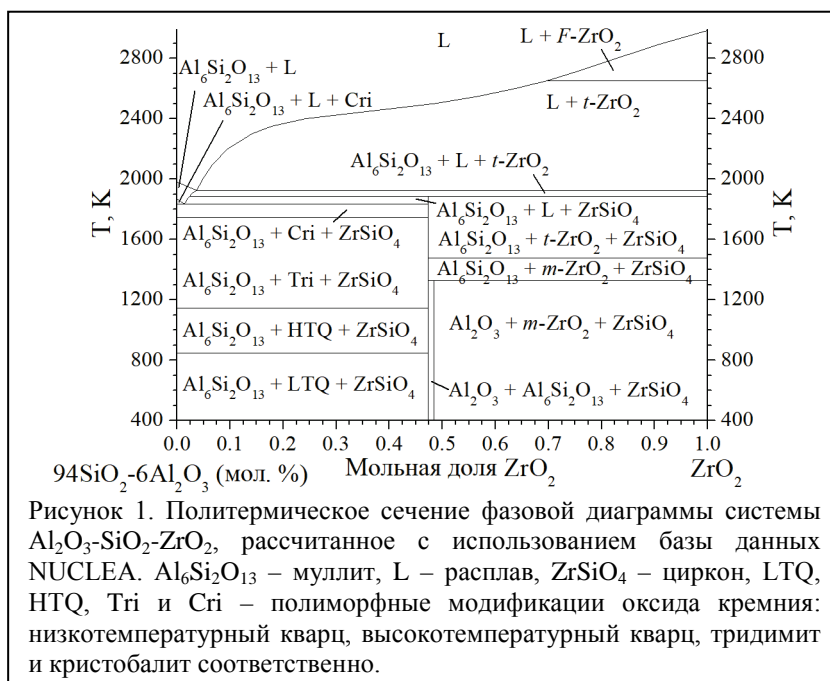


Рисунок 1. Политермическое сечение фазовой диаграммы системы  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-ZrO}_2$ , рассчитанное с использованием базы данных NUCLEA.  $\text{Al}_6\text{Si}_2\text{O}_{13}$  – муллит, L – расплав,  $\text{ZrSiO}_4$  – циркон, LTQ, HTQ, Tri и Cri – полиморфные модификации оксида кремния: низкотемпературный кварц, высокотемпературный кварц, тридимит и кристобалит соответственно.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и ГК «Росатом» (проект № 20-21-00056).*

1. Wang W., Ma S., Fuh J.Y.H. et al. // Int. J. Adv. Manuf. Technol. 2013. T. 68. С. 2565.
2. Baudnn C., Criado E., Bakali J.J. et al. // J. Eur. Ceram. Soc. 2011. V. 31. С. 697–703.
3. Claussen N., Jahn J. // J. Am. Ceram. Soc. 1980. V. 63. P. 228–229.
4. Tummala R.R. // J. Am. Ceram. Soc. 1991. V. 74. P. 895–908.
5. Bakardjieva S., Barrachin M., Bechta S. et al. // Prog. Nucl. Energy. 2010. V. 52. P. 84.
6. Vorozhtcov V.A., Yurchenko D.A., Almjashhev V.I. et al. // Glass Phys. Chem. 2021. T. 47. С. 417–426.