

ТРЕТЬЕ ПОКОЛЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ SiO₂

*Баженова И.А.,^{*1} Кондратьев А.В.,¹ Хван А.В.,¹
Динсдейл А.Т.^{2,3}*

¹*MISCuC, Москва, Россия, ²Hampton Thermodynamics Ltd, Hampton,
Великобритания, ³BCAST, Uxbridge, Великобритания
^{*}irabajenova00@mail.ru*

Современное описание термодинамических свойств элементов и веществ требует создания моделей, которые будут иметь физический смысл и при этом достаточно точно описывать свойства веществ от 0 К до температур выше плавления.

В работе для описания термодинамических свойств диоксида кремния были использованы расширенная модель Эйнштейна [1] и модель жидкости двух состояний [2]. Расширенная модель Эйнштейна, учитывающая вклад гармонических вибраций в теплоемкость, была использована для термодинамического описания α - и β -кварца и α - и β -кристобалита. Для описания диоксида кремния в стеклообразном и жидком состоянии (приняты в расчет в виде одной фазы) была использована модель двух состояний, согласно которой жидкость состоит из атомов двух типов. На основании критического обзора экспериментальных данных была проведена оптимизация параметров модели в программе ThermoCalc [3]. В более ранних работах модель жидкости двух состояний применялась для описания термодинамических свойств чистых элементов (в основном, металлов). Однако, данные по теплоемкости в переохлажденном состоянии для чистых металлов крайне ограничены и, как следствие, это осложняет или делает невозможным сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными. Тестирование описательного потенциала модели для оксидных расплавов (например, чистого SiO₂), для которых существует большое количество экспериментальных данных по теплоёмкости в аморфном состоянии и состоянии переохлажденной жидкости еще не проводилось и поэтому представляло особый интерес.

Модели, полученные в данной работе, хорошо описывают данные по низкотемпературной и высокотемпературной теплоёмкости фаз, а также хорошо соотносятся с данными по S₂₉₈ и инкременту энтальпии.

-
1. Chase M., Ansara I., Dinsdale A., Eriksson G., Grimvall G., Hoglund H., Yokokawa H. // Calphad 19(4) (1995) 437-447.
 2. Agren // J., J. Phys. Chem. Liq. 1988;18:123-139.
 3. J.-O. Andersson, T. Helander, L. Hoglund, P. Shi, and B.Sundman // Calphad 26, (2002), 273-312.