УДК 54.22 : 001.57 : 666.5 + 666.61

ВИВЧЕННЯ БУДОВИ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ СИСТЕМ ШЛЯХОМ 3D МОДЕЛЮВАННЯ ЇХ СУБСОЛІДУСНОЇ ЧАСТИНИ НА ПРИКЛАДІ СИСТЕМИ $Na_2O–K_2O–Al_2O_3–SiO_2$

О. Ю. Федоренко
Доктор технічних наук, доцент, професор*
E-mail: fedorenko_e@ukr.net
К. М. Фірсов
Кандидат технічних наук, науковий співробітник
ТОВ Шатлигін и Ко
вул. Чайковская, 21а, м. Харків, Україна, 61002
К. Б. Дайнеко
Аспірант*
E-mail: Caterine@i.ua
*Кафедра технології кераміки, вогнетривів, скла та емалей
Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут»
вул. Фрунзе, 21, м. Харків, Україна, 61002

На основі результатів дослідження субсолідусного стану системи $Na_2O–K_2O–Al_2O_3–SiO_2$ побудована 3D-модель її частини в області існування польових шпатів. Встановлено будову перетинів висококремнеземної області системи, які є основою для проектування композицій щільноспеченої кераміки. Проілюстрована перспективність 3D-моделювання при вивченні багатокомпонентних оксидних систем

Ключові слова: будова систем в субсолідусі, 3D-моделювання

На основе результатов исследования субсолидусного состояния системы $Na_2O–K_2O–Al_2O_3–SiO_2$ построена 3D-модель части системы в области существования полевых шпатов. Установлено строение связей высококремнеземистой области системы, которые являются основой для проектирования композиций плотноспеченной керамики. Показана перспективность 3D-моделирования при изучении многокомпонентных оксидных систем

Ключевые слова: строение систем в субсолидусе, 3D-моделирование

1. Вступ

Як відомо, науково обґрунтований вибір композицій для отримання матеріалу із заданим фазовим складом базується на вивченні діаграм стану систем фазоутворюючих оксидів. Аналіз та використання цих даних в ході фізико-хімічних досліджень дозволяють здійснювати прогноз умов утворення рідкої фази при термообробці матеріалу, робити оцінку динаміки її накопичення в заданих температурних умовах; визначати умови утворення кристалічних фаз, які формують заданий фазовий склад матеріалу; оцінювати технологічність проектованих композицій з точки зору відтворюваності фазового складу продуктів випалу, визначального властивості матеріалу; судити про відповідність температур фазових перетворень (плавлення, кристалізації) умовами ведення технологічного процесу.

В більшості випадків при розв'язанні технологічних задач на практиці використовуються багатокомпонентні системи, більшість яких не вивчались, або досліджені недостатньо. При вивченні будови багатокомпонентних систем необхідним є визначення кількості співіснуючих фаз, кількості елементарних тетраедрів, в яких присутня кожна з фаз, відносних довжин усіх конод системи, які сполучають співіснуючі фази, відносного об'єму та ступеню асиметрії елементарних тетраедрів. Цей підхід реалізується за допомогою методики, докладно викладеної в роботі А.С. Бережного [1]. У свою чергу аналіз властивостей кристалічних фаз (твердість, хімічна стійкість, ТКЛР, показник заломлення, температура плавлення та ін.) дозволяє вибрати для розробки складів оптимальну область для отримання заданого комплексу експлуатаційних характеристик синтезованого матеріалу. У зв'язку з вищевикладеним актуальною задачею є дослідження можливості використання методу 3D моделювання з використанням існуючих програмних продуктів та створення нового підходу до вивчення будови багатокомпонентних оксидних систем.

2. Теоретичні передумови та методи досліджень

Серед чотирикомпонентних систем, які представляють інтерес для технології щільноспечених керамічних матеріалів різного функціонального призначення, особливу увагу привертає система $K_2O–Na_2O–Al_2O_3–SiO_2$, що є основою для створення тонкокерамічних матеріалів і, зокрема, фарфору. Трикомпонентні підсистеми, що її складають, вивчалися Дж. Шерером, Н. Боуном, Е. Осборном та А. Муаном, якими встанов-

© О. Ю. Федоренко, К. М. Фірсов, К. Б. Дайнеко, 2013

лена будова цих систем в областях, що представляють інтерес для геології, оскільки включають мінерали, що входять до складу поширених в природі пегматитів, гранітів, нефелін-сієнітів та інших фельдшпатоідних порід [2 – 7]. Високолужні області представлених систем досі не вивчені.

У тому випадку, якщо відомості про будову потрійних систем відсутні, але є дані про існуючі в них сполуки, для вивчення багатокомпонентних систем використовують метод розкладання на елементарні політопи, який полягає у виявленні співіснуючих фаз з використанням термодинамічних розрахунків і наступному визначенні температур та складів евтектик шляхом вирішення системи рівнянь.

Перша спроба вивчення будови системи K_2O–Na_2O–Al_2O_3–SiO_2 належить А.С. Бережному [1], який прийнявши ряд припущень, встановив, що в області субсолідусу вона розбивається на 68 елементарних тетраедри, здійснив їх геометро-топологічну характеристику та побудував топологічний граф, що відображає положення тетраедрів в концентраційному просторі системи. Пізніше авторами роботи [8] з використанням сучасних термодинамічних даних будову цієї системи, обмеженої сполуками $Na_2O{\cdot}Al_2O_3{\cdot}6SiO_2$, $K_2O{\cdot}Al_2O_3{\cdot}6SiO_2$, $K_2O{\cdot}4SiO_2$, $Na_2O{\cdot}3SiO_2$, SiO_2 було відкореговано: визначено склади нових співіснуючих тетраедрів, розраховані їх геометро-топологічні характеристики і температури евтектики. Нові дані склали підгрунтя для вивчення чотирикомпонентної системи з використанням методу 3*D*-моделювання, який був реалізований нами з використанням програми для автоматизованого проетування та побудови об'ємних зображень Компас-3*D* (версія *V*13) [9].

3. Результати досліджень та їх обговорення

Очевидною особливістю багатокомпонентних систем є складні міжфазові взаємодії, характер яких площинні зображення відображають недостатньо точно. Переваги параметричного просторового моделювання в Компас-3*D* демонструє створена нами на основі літературних даних та результатів власних досліджень [1, 8] 3*D* модель висококремнеземистої частини чотирикомпонентної системи K_2O–Na_2O–Al_2O_3–SiO_2 в області існування польових шпатів (рис. 1а).

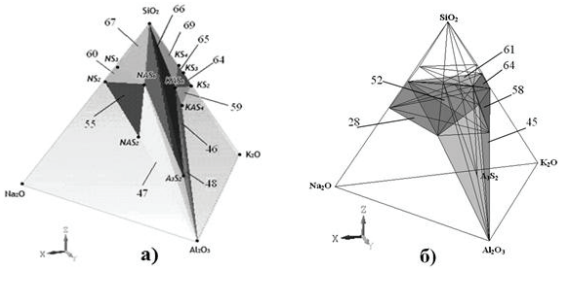

Рис. 1. 3D-модель субсолідусної частини системи Na_2O–K_2O–Al_2O_3–SiO_2 в області існування польових шпатів: а) зовнішній вигляд; б) будова внутрішнього об'єму системи

Ця модель надає більш наглядну уяву про форму, розміри, положення та форму елементарних тетраедрів, дозволяє візуалізувати їх розташування і взаємозв'язок, спостерігати їх об'єм і ступінь асиметрії, відключати при необхідності зображення верхніх тетраедрів, які приховують положення тих, що знаходяться у внутрішньому об'ємі системи (рис. 1б).

Окрім значного підвищення ефективності роботи при вивченні будови багатокомпонентних систем застосування 3*D*-моделювання несе в собі цілий ряд переваг. Так, використання 3*D*-моделі дозволяє побачити зображення перетинів системи в будь-якій площині, для концентрацій компонентів, що задаються (рис. 2).

Як доповнення до викладеного такий підхід надає можливість фіксувати вид перетинів під будь-яким кутом, зручним для аналізу, відключати верхні шари зображення, а також одержувати зображення системи і її перетинів як в поліхромній якості, так і у вигляді контурних ліній, що обмежують елементарні об'єми.

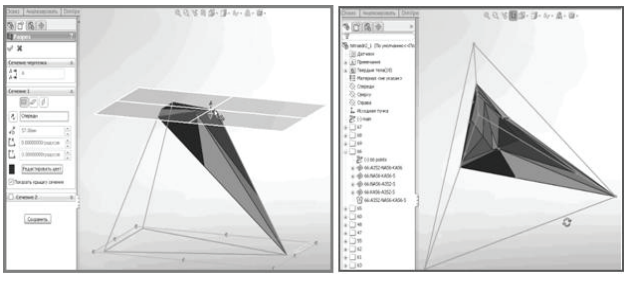

Рис. 2. Побудова перетину моделі та одержання його фронтального виду

3*D*-візуалізація дослідної чотирикомпонентної системи дозволила визначити найбільш широку область складів в тетраедрі № 66, використання якої забезпечить стале отримання заданого фазового складу щільноспечених матеріалів при порівняно невисоких температурах термообробки. Отримані дані використані для побудови перетинів системи Na_2O–K_2O–Al_2O_3–SiO_2 із вмістом SiO_2 = 60, 65, 70 мас %. Приклад побудови представлено на рис. 3.

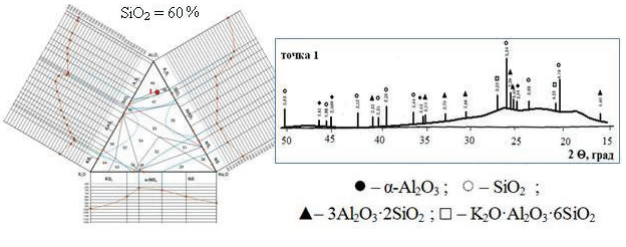

Рис. 3. Перетин системи Na_2O–K_2O–Al_2O_3–SiO_2 (SiO_2 = 60 мол.%) та фазовий склад продуктів термообробки контрольної суміші

Справедливість проведених побудов ґрунтується на фізико-хімічних засадах побудови діаграм стану оксидних систем та підтверджена результатами рентгенофазового аналізу, які свідчать про те, що склад продуктів випалу контрольної суміші при 1200 °С відповідає теоретичному фазовому складу згідно їх положення у визначених перетинах системи.

З використанням отриманих даних розроблено оксидні і сировинні композиції для отримання щільноспеченої кераміки при пониженій температурі

синтезу, що дозволило створити енергоощадні технології керамогранітної плитки і фарфору різної номенклатури [10].

4. Висновки

Таким чином, в результаті проведених досліджень побудовано 3*D*-модель висококремнеземної області системи $Na_2O–K_2O–Al_2O_3–SiO_2$ та отримано нові відомості про будову її перетинів, які є найперспективнішими для розробки щільноспечених керамічних матеріалів різного функціонального призначення. Представлений матеріал наочно ілюструє переваги 3*D* моделювання при дослідженні багатокомпонентних систем має свої переваги, що робить цей підхід безумовно перспективним.

Література

1. Бережной, А.С. Многокомпонентные щелочные оксидные системы [Текст] / А.С. Бережной. - К. : Наукова думка, 1988. - 200 с.
2. Osborn, E. F. System K2O-Al2O3-SiO2 ; composite [Електронний ресурс] : Phase Equilibrium Diagrams of Oxide Systems NIST Standart Reference Database 31 vol. 01 / E. F Osborn, A. Muan – fig. 00407, 1960 – 1 електрон. опт. диск (CD-ROM) : кольор. ; 12 см. – (ACerS-NIST Phase Equilibria Diagrams CD-ROM Database v. 3.1.0, 2006). – Систем. вимоги : 128 Mb RAM ; 200 Mb available HDD ; CD-ROM Windows 98/Me/2000/NT/XP. – Назва з титул. екрану. – ISBN 0-916094-04-9
3. Osborn, E.F. System Na2O-Al2O3-SiO2 ; composite [Електронний ресурс] : Phase Equilibrium Diagrams of Oxide Systems NIST Standart Reference Database 31 vol. 01 / E. F. Osborn, A. Muan. – fig. 00501, 1960 — 1 електрон. опт. диск (CD-ROM) : кольор. ; 12 см. – (ACerS-NIST Phase Equilibria Diagrams CD-ROM Database v. 3.1.0, 2006). – Систем. вимоги : 128 Mb RAM ; 200 Mb available HDD; CD-ROM Windows 98/Me/2000/NT/XP. – Назва з титул. екрану. – ISBN 0-916094-04-9.
4. Schairer, J.F. System NaAlSiO4-KAlSiO4-SiO2 ; revised [Електронний ресурс] : Phase Equilibrium Diagrams of Oxide Systems NIST Standart Reference Database 31 vol. 01 / J.F. Schairer, J. Geol. – fig. 00786, 1950 – 1 електрон. опт. Диск (CD-ROM) : кольор. ; 12 см. – (ACerS-NIST Phase Equilibria Diagrams CD-ROM Database v. 3.1.0, 2006). – Систем. Вимоги : 128 Mb RAM ; 200 Mb available HDD ; CD-ROM Windows 98/Me/2000/NT/XP. — Назва з титул. екрану. – ISBN 0-916094-04-9.
5. Moir, G. K. System Na2O-Al2O3-SiO2 ; composite [Електронний ресурс] : Phase Equilibrium Diagrams of Oxide Systems NIST Standart Reference Database 31, annual-91 / G. K. Moir, F. P. Glasser. – fig. 91–108, 1976. – 1 електрон. опт. диск (CD-ROM) : кольор. ; 12 см. – (ACerS-NIST Phase Equilibria Diagrams CD-ROM Database v. 3.1.0, 2006). – Систем. вимоги : 128 Mb RAM ; 200 Mb available HDD ; CD-ROM Windows 98/Me/2000/NT/XP. – Назва з титул. екрану. – ISBN 0-944904-42-4.
6. Минералы. Диаграммы фазовых равновесий: справочник / [сост. В. В. Лапин, Н. И. Овсянникова ; отв. ред. В. Ф. Чухров]. – М. : Наука, 1974. – Вып. 1: Фазовые равновесия, важные для природного минералообразования. – 1974. – 514 с.
7. Минералы. Диаграммы фазовых равновесий: справочник [сост. В. В. Лапин, Н. И. Овсянникова; отв. ред. В. Ф. Чухров]. – М.: Наука, 1974. – Вып. 2: Фазовые равновесия, важные для технического минералообразования. – 1974. – 490 с.
8. Рыщенко, М.И. Теоретические и технологические основы получения энергоэффективных каменно-керамических материалов разного функционального назначения [Текст] / М.И. Рыщенко, Е.Ю. Федоренко, Г.В. Лисачук, М.А. Чиркина // Инновационные материалы и технологии: междунар.науч.-техн. конф., 11–12 октября 2011 г.: сб. докл. – Белгород: БГТУ, 2011. – Ч. 3. – С. 178 – 183.
9. Большаков, В.П. Создание трехмерных моделей и конструкторской документации в системе КОМПАС-3D: Практикум [Текст] / В.П. Большаков, А.Л.Бочков, А.А. Сергеев. – СПб: БХВ-Петербург, 2010. – 496 с.
10. Федоренко, О.Ю. Щільноспечена кераміка поліфункціонального призначення з пониженою температурою синтезу [Текст] : автореф. дис. на здобуття наук. ступеня докт. техн. наук спец. 05.17.11 «Технологія тугоплавких неметалічних матеріалів» / О.Ю. Федоренко; [НТУ «ХПИ»]. – Харків, 2012. – 36 с.