

# Физическая химия и физика металлургических систем

УДК 669.18 + 544.015.3

DOI: 10.14529/met210401

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ В СИСТЕМЕ SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>\*

Л.А. Макроец<sup>1</sup>, О.В. Самойлова<sup>1</sup>, И.В. Бакин<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия,

<sup>2</sup> ООО НПТ Технология, г. Челябинск, Россия

Проведено термодинамическое моделирование фазовых равновесий с последующим построением диаграммы состояния системы SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Для расчета активностей оксидного расплава в ходе настоящей работы использовали приближение теории субрегулярных ионных растворов, при этом наиболее оптимальными оказались значения энергетических параметров  $Q_{1112} = -104\,349$ ;  $Q_{1122} = -217\,689$ ;  $Q_{1222} = -104\,436$  Дж/моль. Полученные результаты по положению линии ликвидус в исследуемой системе имеют хорошее соответствие с экспериментальными литературными данными. В ходе расчета оценены значения констант равновесия реакций образования алюминатов стронция из компонентов оксидного расплава.

*Ключевые слова:* термодинамическое моделирование, теория субрегулярных ионных растворов, система SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, оксид стронция, фазовые равновесия.

### Введение

Изучение фазовых равновесий, реализующихся в системе SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, представляет интерес в связи с тем, что данная система входит в состав шлаковой фазы как при производстве новых марок ферросплавов с добавками стронция [1], так и при производстве сталей, модифицированных стронцийсодержащими сплавами [2–5].

В литературе имеются данные по диаграмме состояния системы SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [1, 6–14], которые достаточно сильно отличаются между собой. Так согласно большинству авторов в системе SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> образуются пять алюминатов стронция: Sr<sub>4</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>7</sub>, Sr<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>, SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, SrAl<sub>4</sub>O<sub>7</sub>, SrAl<sub>12</sub>O<sub>19</sub>. Однако в работе [10] помимо указанных соединений обсуждается возможность образования еще двух алюминатов – Sr<sub>5</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>8</sub> и Sr<sub>4</sub>Al<sub>14</sub>O<sub>25</sub>, а в работе [11], наоборот, указывается на наличие только четырех соединений в исследуемой системе (отсутствует биалюминат стронция). Согласно сведениям из разных источников различен и характер плавления указанных выше соединений (конгруэнтный или инконгруэнтный),

а температуры как для плавления соединений, так и для эвтектических превращений отличаются у некоторых авторов почти на сто пятьдесят градусов. Таким образом, система SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> требует дополнительных исследований, в том числе и оценки реализующихся фазовых равновесий с позиций термодинамического анализа.

Целью настоящей работы является термодинамическое моделирование фазовых равновесий в системе SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с последующим построением диаграммы состояния данной системы.

### Методика моделирования

Подробно методика используемого нами термодинамического моделирования фазовых равновесий в диаграммах состояния оксидных систем приведена в работах [15–17]. Кратко методику моделирования оксидных систем можно описать следующим образом. Согласно используемым алгоритмам расчет опирается на экспериментальные данные (из представленных в литературе) по координатам (составе и температуре) характерных точек

\* Оригинал статьи вышел на английском языке: Makrovets L.A., Samoilova O.V., Bakin I.V. Thermodynamic Assessment of Phase Equilibria in the SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> System. *Defect and Diffusion Forum*, 2021, vol. 410, pp. 725–729. DOI: 10.4028/www.scientific.net/DDF.410.725

фазовых диаграмм: точек эвтектических, перитектических, фазовых переходов и т. п. С учетом этих данных подбираются параметры выбранной для расчета термодинамической модели, и далее просчитывается полностью вся линия или поверхность ликвидус исследуемой системы.

Значения параметров используемой термодинамической модели определяются в процессе решения систем нелинейных уравнений, для чего применяется метод Ньютона. Для составления уравнений необходимы (как уже говорилось ранее) данные о координатах ряда характерных точек, выбранных на линии или поверхности ликвидус фазовых диаграмм. Для каждой характерной точки составляется выражение, связывающее ее координаты с параметрами используемой для расчета термодинамической модели.

Значения координат характерных точек могут отличаться согласно различным вариантам диаграммы состояния, приведенным в литературе. Соответственно, для каждого из имеющихся вариантов диаграммы состояния были подобраны энергетические параметры теории и оценены значения констант равновесия реакций образования алюминатов стронция из компонентов оксидного расплава. Затем была проведена термодинамическая оценка полученных расчетных данных (оценивали параметры используемой термодинамической модели, расчетные значения активностей оксидного расплава, данные по фазовым переходам (например, константы, характеризующие процесс перехода твердого вещества в жидкое состояние), а также вид по-

лученной линии или поверхности ликвидус). На основании проведенной оценки выбирали наилучший вариант, при этом возможно некоторое отличие значений координат характерных точек по отношению к оригинальным литературным данным, если варьирование (как правило, незначительное) приводило к улучшению показателей для термодинамической оценки результатов.

## Результаты и их обсуждение

Для системы SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> наиболее оптимальные результаты по термодинамическому моделированию были получены при использовании для расчета активностей оксидного расплава модели субрегулярных ионных растворов [15] с энергетическими параметрами  $Q_{1112} = -104\,349$ ;  $Q_{1122} = -217\,689$ ;  $Q_{1222} = -104\,436$  Дж/моль. Термодинамические данные по полученным константам, характеризующим процесс перехода твердого вещества в жидкое состояние, используемым при расчете диаграммы состояния системы SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, приведены в табл. 1.

Результаты моделирования фазовых равновесий и диаграммы состояния системы SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в сравнении с литературными данными приведены на рисунке и в табл. 2.

Согласно проведенной термодинамической оценке наиболее стабильными в системе являются пять соединений Sr<sub>4</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>7</sub>, Sr<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>, SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, SrAl<sub>4</sub>O<sub>7</sub>, SrAl<sub>12</sub>O<sub>19</sub>, что совпадает с данными работ [1, 6–9]. Алюминаты стронция Sr<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub> и SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> имеют конгруэнтный характер плавления, остальные три соединения – инконгруэнтный. Полученный вид линии

Таблица 1

Термодинамические данные для реакций фазовых превращений,  $K_{пл}$  – константа плавления оксидов и их соединений

№	Реакция	$\lg K_{пл} = -A/T + B$		Источник
		A	B	
1*	$ \text{FeO}  = (\text{FeO})$	1749	1,059	[18, 19]
2*	$ \text{SrO}  = (\text{SrO})$	4229	1,507	[20]
3*	$ \text{Al}_2\text{O}_3  = (\text{Al}_2\text{O}_3)$	5683	2,447	[18]
4	$ \text{FeAl}_2\text{O}_4  = (\text{FeO}) + (\text{Al}_2\text{O}_3)$	11 366	4,568	[17]
5	$ \text{Sr}_4\text{Al}_2\text{O}_7  = 4(\text{SrO}) + (\text{Al}_2\text{O}_3)$	9023	-0,908	Данная работа
6	$ \text{Sr}_3\text{Al}_2\text{O}_6  = 3(\text{SrO}) + (\text{Al}_2\text{O}_3)$	11 797	1,020	Данная работа
7	$ \text{SrAl}_2\text{O}_4  = (\text{SrO}) + (\text{Al}_2\text{O}_3)$	9101	1,533	Данная работа
8	$ \text{SrAl}_4\text{O}_7  = (\text{SrO}) + 2(\text{Al}_2\text{O}_3)$	7653	0,449	Данная работа
9	$ \text{SrAl}_{12}\text{O}_{19}  = (\text{SrO}) + 6(\text{Al}_2\text{O}_3)$	16 523	3,546	Данная работа

\* Для чистых твердых веществ константы пересчитывались по данным о температуре и энтальпии плавления данных веществ.

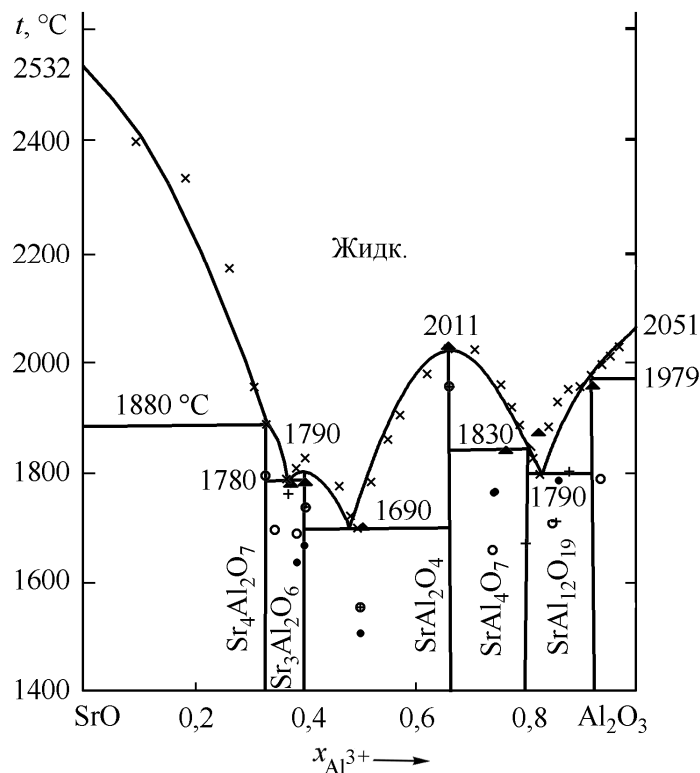


Диаграмма состояния системы SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:  
— — расчет, данная работа; • – [6]; ○ – [7]; × – [8]; + – [9]; ▲ – [10]

Таблица 2

Инвариантные точки системы SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Фазовое равновесие	Характер инвариантного превращения	Состав, ион. доля Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	t, °C	Источник
SrO + Sr <sub>4</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>7</sub> + жидкость	Перитектика	0,347	1690	Massazza F. [6]
		0,355	1765	Ye X. [9]
		0,324	1800	Ганиц Ф. [7]
		0,333	1880	Starczewski M. [8]
		0,333	1880	Данная работа
Sr <sub>4</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>7</sub> + Sr <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>6</sub> + жидкость	Эвтектика	0,381	1630	Massazza F. [6]
		0,392	1731	Ye X. [9]
		0,368	1781	Shukla A. [10]
		0,384	1687	Ганиц Ф. [7]
		0,374	1780	Starczewski M. [8]
Sr <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>6</sub> + жидкость	Плавление	0,400	1660	Massazza F. [6]
		0,400	1735	Ye X. [9]
		0,400	1782	Shukla A. [10]
		0,400	1736	Ганиц Ф. [7]
		0,400	1820	Starczewski M. [8]
Sr <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>6</sub> + SrAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> + жидкость	Эвтектика	0,492	1505	Massazza F. [6]
		0,525	1557	Ye X. [9]
		0,496	1706	Shukla A. [10]
		0,496	1560	Ганиц Ф. [7]
		0,496	1690	Starczewski M. [8]
		0,482	1690	Данная работа

Фазовое равновесие	Характер инвариантного превращения	Состав, ион. доля $Al_2O_3$	$t, ^\circ C$	Источник
$SrAl_2O_4$ + жидкость	Плавление	0,667	1960	Massazza F. [6]
			1960	Ye X. [9]
			2016	Shukla A. [10]
			1960	Ганиц Ф. [7]
			2015	Starczewski M. [8]
$SrAl_2O_4$ + $SrAl_4O_7$ + жидкость	Эвтектика	0,734	1760	Massazza F. [6]
		0,737	1660	Ганиц Ф. [7]
		0,754	1830	Shukla A. [10]
	Перитектика	0,800	1664	Ye X. [9]
		0,800	1830	Starczewski M. [8]
		0,800	1830	Данная работа
$SrAl_4O_7$ + $SrAl_{12}O_{19}$ + жидкость	Перитектика	0,825	1857	Shukla A. [10]
	Эвтектика	0,852	1780	Massazza F. [6]
		0,843	1704	Ye X. [9]
		0,846	1710	Ганиц Ф. [7]
		0,825	1790	Starczewski M. [8]
		0,838	1790	Данная работа
	$SrAl_{12}O_{19}$ + $Al_2O_3$ + жидкость	Перитектика	0,874	1794
0,920			1962	Shukla A. [10]
0,934			1790	Ганиц Ф. [7]
0,922			1960	Starczewski M. [8]
0,934			1979	Данная работа
$SrO$ + жидкость	Допол. точка	0,292	2000	Данная работа
$Al_2O_3$ + жидкость	Допол. точка	0,951	2000	Данная работа

ликвидус имеет наибольшее соответствие с экспериментальными данными М. Starczewski [8], так как по проведенным расчетам, представленные именно им характерные точки на исследуемой диаграмме позволяют получить термодинамически значимый комплект расчетных данных, включая адекватное описание активностей оксидного расплава и вид положения линии ликвидус. При использовании данных других авторов константы, характеризующие процесс перехода твердого вещества в жидкое состояние для алюминатов стронция, имеют большие отрицательные значения, что с позиций термодинамического анализа не имеет смысла. Следует отметить, что эти константы отражают оценочные значения энтальпий и энтропий образования данных соединений из компонентов оксидного расплава и не могут численно выражаться большими отрицательными значениями.

### Заключение

Проведены термодинамическая оценка и расчет фазовых равновесий в системе  $SrO-Al_2O_3$  с использованием теории субрегулярных ионных растворов. На основании этих расчетов построена диаграмма состояния данной системы (определено положение линии ликвидус). Согласно проведенной термодинамической оценке наиболее стабильными в системе являются пять соединений  $Sr_4Al_2O_7$ ,  $Sr_3Al_2O_6$ ,  $SrAl_2O_4$ ,  $SrAl_4O_7$ ,  $SrAl_{12}O_{19}$ , что совпадает с большинством из имеющихся литературных данных. В ходе работы были оценены константы, характеризующие процесс перехода твердого вещества в жидкое состояние. Для алюминатов стронция эти константы отображают энтальпии и энтропии их образования из компонентов оксидного расплава.

### Литература

1. Tang, K. *Thermodynamic evaluation of Sr-containing Si metals and silicate melts for Si–Sr alloy production* / K. Tang, L.K. Jakobsson, K. Hildal // *Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy*. – 2018. – Vol. 118, no. 6. – P. 601–605. DOI: 10.17159/2411-9717/2018/v118n6a7
2. Экспериментальное исследование рафинирования и модифицирования стали сплавами Si–Ca, Si–Sr и Si–Ba / И.В. Бакин, Н.А. Шабурова, И.В. Рябчиков и др. // *Сталь*. – 2019. – № 8. – С. 14–18.
3. Breitzmann, M. *Refining of steel melts using alkaline earth metals* / M. Breitzmann, H.-J. Engell, D. Janke // *Steel Research*. – 1988. – Vol. 59, no. 7. – P. 289–294. DOI: 10.1002/srin.198801505
4. Модифицирование стали барием и стронцием / И.Д. Рожихина, О.И. Нохрина, В.И. Дмитриенко, М.А. Платонов // *Известия высших учебных заведений. Черная металлургия*. – 2015. – Т. 58, № 12. – С. 871–876. DOI: 10.17073/0368-0797-2015-12-871-876
5. *Methods for improving the efficiency of steel modifying* / I.V. Bakin, G.G. Mikhailov, V.A. Golubtsov et al. // *Materials Science Forum*. – 2019. – Vol. 946. – P. 215–222. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.946.215
6. Massazza, F. *Il Sistema SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>* // *La Chimica e l'industria*. – 1959. – Vol. XLI, no. 2. – P. 108–115.
7. Ганиц, Ф. Система SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / Ф. Ганиц, Т.Ю. Чемникова, Ю.П. Удалов // *Журнал неорганической химии*. – 1979 – Т. XXIV, вып. 2. – С. 471–475.
8. Starczewski, M. *Treatise on Solid State Reactions in the Ternary System SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–SiO<sub>2</sub>* / M. Starczewski // *Zeszyty Nauk. Politech. Slask. Chem.* – 1964. – Vol. 22. – P. 5–75.
9. *Thermodynamic description of SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system and comparison with other systems*. / X. Ye, W. Zhuang, J. Wang et al. // *J. Phase Equilib. Diffus.* – 2007. – Vol. 28. – P. 362–368. DOI: 10.1007/s11669-007-9086-x
10. Shukla, A. *Development of a Critically Evaluated Thermodynamic Database for the Systems Containing Alkaline-Earth Oxides* (PhD thesis, École Polytechnique de Montréal). – 2012. – 321 p.
11. Sung, Y.-M. *Sintering and crystallization of off-stoichiometric SrO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>·2SiO<sub>2</sub> glasses* / Y.-M. Sung, S. Kim // *Journal of Materials Science*. – 2000. – Vol. 35, no. 17. – P. 4293–4299. DOI: 10.1023/a:1004880201847
12. Capron, M. *Strontium Dialuminate SrAl<sub>4</sub>O<sub>7</sub>: Synthesis and Stability* / M. Capron, A. Douy // *Journal of the American Ceramic Society*. – 2004. – Vol. 85, no. 12. – P. 3036–3040. DOI: 10.1111/j.1151-2916.2002.tb00575.x
13. Корогодская, А.Н. Термодинамическая база данных огнеупорных алюминатов стронция / А.Н. Корогодская, Г.Н. Шабанова // *36. наукових праць ПАТ «УкрНДІВогнетривів ім. А.С. Бежежного»*. – 2012. – № 112. – С. 208–213.
14. *Phase Transition in SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>* / S. Ito, S. Banno, K. Suzuki, M. Inagaki // *Zeitschrift Für Physikalische Chemie*. – 1977. – Vol. 105, no. 3–4. – P. 173–178. DOI: 10.1524/zhph.1977.105.3\_4.173
15. Михайлов, Г.Г. Термодинамика металлургических процессов и систем / Г.Г. Михайлов, Б.И. Леонович, Ю.С. Кузнецов. – М.: Издат. Дом МИСус. – 2009. – 520 с.
16. Самойлова, О.В. Термодинамическое моделирование фазовой диаграммы системы Si<sub>2</sub>O–Na<sub>2</sub>O–K<sub>2</sub>O / О.В. Самойлова, Л.А. Макроец, Е.А. Трофимов // *Вестник Московского университета. Серия 2: Химия*. – 2018. – Т. 59, № 3. – С. 196–204.
17. *Samoilova, O.V. Thermodynamic Modeling of Phase Equilibria in the FeO–MgO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> System* / O.V. Samoilova, L.A. Makrovets // *Materials Science Forum*. – 2020. – Vol. 989. – P. 3–9. DOI: 10.4028/www.scientific.net/msf.989.3
18. Кубашевский, О. Металлургическая термехимия / О. Кубашевский, С.Б. Олкокк. – М.: Металлургия, 1982. – 392 с.
19. Darken, L.S. *The system iron–oxygen. II. Equilibrium and thermodynamics of liquid oxide and other phases* / L.S. Darken, R.W. Gurry // *Journal of American Chemical Society*. – 1946. – Vol. 68. – P. 798–816. DOI: 10.1021/ja01209a030
20. Иргашов, Х. Термодинамические свойства оксида стронция в твердой и жидкой фазах / Х. Иргашов, В.Д. Тарасов, В.Я. Чеховской // *Теплофизика высоких температур*. – 1985. – Т. 23, № 1. – С. 86–91.

**Макровец Лариса Александровна**, инженер кафедры материаловедения и физико-химии материалов, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; makrovetsla@susu.ru.

**Самойлова Ольга Владимировна**, канд. хим. наук, старший научный сотрудник кафедры материаловедения и физико-химии материалов, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; samoylova\_o@mail.ru

**Бакин Игорь Валерьевич**, начальник отдела инновации, модернизации и технического развития, ООО НПП Технология, г. Челябинск; igor.npp.bakin@gmail.com.

Поступила в редакцию 17 сентября 2021 г.

---

DOI: 10.14529/met210401

### THERMODYNAMIC ASSESSMENT OF PHASE EQUILIBRIA IN THE SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> SYSTEM

**L.A. Makrovets**<sup>1</sup>, makrovetsla@susu.ru,  
**O.V. Samoylova**<sup>1</sup>, samoylova\_o@mail.ru,  
**I.V. Bakin**<sup>2</sup>, igor.npp.bakin@gmail.com

<sup>1</sup> South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation,

<sup>2</sup> NPP Technology LLC, Chelyabinsk, Russian Federation

Thermodynamic modeling of phase equilibria with the subsequent construction of the phase diagram of the SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system has been carried out. To calculate the activities of the oxide melt in the course of this work, we used the approximation of the theory of subregular ionic solutions, with the most optimal values of the energy parameters  $Q_{1112} = -104\,349$ ;  $Q_{1122} = -217\,689$ ;  $Q_{1222} = -104\,436$  J/mole. The results obtained for the liquidus line in this work are in good agreement with the literature experimental data. In the course of the calculation, the values of the equilibrium constants for the formation of strontium aluminates from the components of the oxide melt were estimated.

*Keywords: thermodynamic modeling, theory of subregular ionic solutions, SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system, strontium oxide, phase equilibria.*

#### References

1. Tang K., Jakobsson L.K., Hildal K. Thermodynamic Evaluation of Sr-Containing Si Metals and Silicate Melts for Si–Sr Alloy Production. *The Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy*, 2018, vol. 118, pp. 601–605. DOI: 10.17159/2411-9717/2018/v118n6a7
2. Bakin I.V., Shaburova N.A., Ryabchikov I.V., Mizin V.G., Belov B.F., Mikhailov G.G., Senin A.V. Experimental study of refining and modification of steel with Si–Ca, Si–Sr and Si–Ba alloys. *Steel in Translation*, 2019, vol. 49, pp. 543–547. DOI: 10.3103/S0967091219080023
3. Breitzmann M., Engell H.-J., Janke D. Refining of steel melts using alkaline earth metals. *Steel Research*, 1988, vol. 59, no. 7, pp. 289–294. DOI: 10.1002/SRIN.198801505
4. Rozhikhina I.D., Nokhrina O.I., Dmitrienko V.I., Platonov M.A. Modification of steel with barium and strontium. *Steel in Translation*, 2015, vol. 45, pp. 908–912. DOI: 10.3103/S0967091215120104
5. Bakin I.V., Mikhailov G.G., Golubtsov V.A., Ryabchikov I.V., Dresvyankina L.E.. Methods for improving the efficiency of steel modifying. *Material Science Forum*, 2019, vol. 946, pp. 215–222. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.946.215
6. Massazza F. Il sistema SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. *La Chimica e l'industria*, 1959, vol. 41, pp. 108–115. (in Italian)
7. Ganits F., Chemekova T.Yu., Udalov Yu.P. The system SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. *Zh. Neorg. Khim.*, 1979, vol. 24, no. 2, pp. 471–475. (in Russ.)

8. Starczewski M. Treatise on solid state reactions in the ternary system SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–SiO<sub>2</sub>. *Zeszyty Nauk. Politech. Slask. Chem.*, 1964, vol. 22, pp. 5–75. (in Polish)
9. Ye X., Zhuang W., Wang J., Yuan W., Qiao Z. Thermodynamic description of SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system and comparison with other systems. *J. Phase Equilib. Diff.*, 2007, vol. 28, pp. 362–368. DOI: 10.1007/s11669-007-9086-x
10. Shukla A. Development of a Critically Evaluated Thermodynamic Database for the Systems Containing Alkaline-Earth Oxides (PhD thesis, École Polytechnique de Montréal), 2012. 321 p.
11. Sung Y.-M., Kim S. Sintering and crystallization of off-stoichiometric SrO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>·2SiO<sub>2</sub> glasses. *J. Mater. Sci.*, 2003, vol. 5, no. 17, pp. 4293–4299.
12. Capron M., Douy A., Strontium dialuminate SrAl<sub>4</sub>O<sub>7</sub>: synthesis and stability. *J. Am. Ceram. Soc.*, 2004, vol. 85, no. 12, pp. 3036–3040. DOI: 10.1111/j.1151-2916.2002.tb00575.x
13. Kogorodskaya A.N., Shabanova G.N. Thermodynamic database of refractory strontium aluminates. *Collection of Scientific Papers of PJSC “The URIR Named after A.S. Berezhnoy”*, 2012, vol. 112, pp. 208–213. (in Ukrainian)
14. Ito S., Banno S., Suzuki K., Inagaki M. Phase transition in SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. *Z. Phys. Chem.*, 1977, vol. 105, pp. 173–178. DOI: 10.1524/zpch.1977.105.3\_4.173
15. Mikhailov G.G., Leonovich B.I., Kuznetsov Yu.S. *Termodinamika metallurgicheskikh protsessov i sistem* [Thermodynamics of Metallurgical Processes and Systems]. Moscow, MISIS Publ., 2009. 520 p.
16. Samoilo O.V., Makrovets L.A., Trofimov E.A. Thermodynamic Simulation of the Phase Diagram of the Cu<sub>2</sub>O–Na<sub>2</sub>O–K<sub>2</sub>O System. *Moscow University Chemistry Bulletin*, 2018, vol. 73, no. 3, pp. 105–110. DOI: 10.3103/S0027131418030057
17. Samoilo O.V., Makrovets L.A. Thermodynamic modeling of phase equilibria in the FeO–MgO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system. *Material Science Forum*, 2020, vol. 989, pp. 3–9. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.989.3
18. Kubaschewski O., Alcock C.B. Metallurgical Thermochemistry. *Pergamon Press Ltd Publ.*, Oxford, 1979. 392 p.
19. Darken L.S., Gurry R.W. The System Iron–Oxygen. II. Equilibrium and Thermodynamics of Liquid Oxide and Other Phases. *Journal of the American Chemical Society*, 1946, vol. 68, pp. 798–816. DOI: 10.1021/ja01209a030
20. Irgashov X., Tarasov V.D., Chekhovskoy V.Ya. Thermodynamic Properties of Strontium Oxide in Solid and Liquid Phases. *High Temperature*, 1985, vol. 23, no. 1, pp. 86–91. (in Russ.)

Received 17 September 2021

---

**ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ**

Макровец, Л.А. Термодинамическое моделирование фазовых равновесий в системе SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / Л.А. Макровец, О.В. Самойлова, И.В. Бакин // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2021. – Т. 21, № 4. – С. 5–11. DOI: 10.14529/met210401

**FOR CITATION**

Makrovets L.A., Samoylova O.V., Bakin I.V. Thermodynamic Assessment of Phase Equilibria in the SrO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> System. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Metallurgy*, 2021, vol. 21, no. 4, pp. 5–11. (in Russ.) DOI: 10.14529/met210401

---