

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ В ОКСИДНОЙ СИСТЕМЕ FeO–SrO–SiO₂

О.В. Самойлова, Л.А. Макроец, И.В. Бакин

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Оксидные системы, включающие оксид стронция в качестве одного из основных компонентов, находят все большее применение в различных отраслях промышленности. Влияние добавок SrO на свойства шлаков и флюсов, на свойства стекол и даже керамики с магнитными свойствами активно изучается в настоящее время. Однако сведений по диаграммам состояния оксидных стронцийсодержащих систем в литературе весьма ограниченное количество, особенно для тройных и многокомпонентных систем. В данном исследовании было проведено термодинамическое моделирование фазовых равновесий и дальнейшее построение диаграмм состояния двойных оксидных систем FeO–SrO, FeO–SiO₂, SrO–SiO₂, а также расчет координат проекции поверхности ликвидус диаграммы состояния тройной оксидной системы FeO–SrO–SiO₂. Моделирование выполнялось с использованием приближения теории субрегулярных ионных растворов. В ходе работы были определены энергетические параметры используемой теории для каждой из исследуемых систем. Полученные расчетные данные о положении линий ликвидуса в двойных оксидных системах сопоставимы с имеющимися в литературе, что подтверждает адекватность проведенного моделирования. Сведения о диаграмме состояния тройной оксидной системы FeO–SrO–SiO₂ в литературе не представлены и получены впервые. В ходе настоящей работы также были оценены данные о температурах, энтальпиях и энтропиях образования силикатов Fe₂SiO₄, Sr₃SiO₅, Sr₂SiO₄, SrSiO₃ из компонентов оксидного расплава систем FeO–SiO₂ и SrO–SiO₂ соответственно. Так, для Fe₂SiO₄ энтальпия образования соединения из компонентов оксидного расплава составила величину 63 600 Дж/моль; для силиката Sr₃SiO₅ – 181 675 Дж/моль; для соединения Sr₂SiO₄ – 169 576 Дж/моль; для SrSiO₃ – 155 697 Дж/моль.

Ключевые слова: система FeO–SrO–SiO₂, термодинамическое моделирование, фазовые равновесия, фазовые диаграммы.

Стронцийсодержащие силикатные системы в настоящее время все чаще становятся объектом исследований благодаря своему применению в различных отраслях промышленности – от металлургии и стекольного производства до производства магнитных материалов [1–6]. Но, несмотря на исследования физико-химических и физических свойств, данных по диаграммам состояния оксидных стронцийсодержащих систем в литературе весьма ограниченное количество, особенно для тройных и многокомпонентных систем. В то же время знание фазовых равновесий, реализующихся в зависимости от внешних параметров в исследуемой системе, является основой успешного технологического процесса.

Целью настоящей работы является термодинамическое моделирование фазовых равновесий и дальнейшее построение диаграмм состояния двойных оксидных систем FeO–SrO, FeO–SiO₂, SrO–SiO₂, а также на основании полученных данных построение диа-

граммы состояния тройной оксидной системы FeO–SrO–SiO₂.

Подробно оригинальная методика моделирования фазовых равновесий в оксидных системах приведена в работах [7–9].

Для выполнения моделирования необходимы данные о температурах и энтальпиях плавления оксидов, входящих в состав исследуемых систем (табл. 1), так как расчет фазовых равновесий с участием оксидов для определения координат линии или поверхности ликвидус требует описания фазового перехода данных оксидов из твердого состояния в жидкое.

В настоящей работе для расчетов использовалась теория субрегулярных ионных растворов, энергетические параметры которой приведены в табл. 2.

Результаты моделирования фазовой диаграммы FeO–SrO приведены на рис. 1. Согласно литературным оценочным расчетным данным [14] диаграмма состояния системы

Таблица 1

Данные о температурах и энтальпиях плавления оксидов

| Оксид | Температура плавления, °С | Энтальпия плавления, Дж/моль |
|---------------------------------|---------------------------|------------------------------|
| FeO | 1378 [10] | 33 470 [11] |
| SrO | 2532 [12] | 80 950 [12] |
| SiO ₂ тридимит | 1680 [13] | 9002 [13] |
| SiO ₂ кristобалит | 1720 [13] | 7704 [13] |

Таблица 2

Энергетические параметры теории субрегулярных ионных растворов

| Система | Энергетические параметры Q_{ijkl} , Дж/моль | | |
|--------------------------|---|------------------------|------------------------|
| FeO–SrO | $Q_{1112} = -71\ 828$ | $Q_{1122} = -22\ 026$ | $Q_{1222} = -20\ 905$ |
| FeO–SiO ₂ | $Q_{1113} = +2000$ | $Q_{1133} = -35\ 000$ | $Q_{1333} = +60\ 000$ |
| SrO–SiO ₂ | $Q_{2223} = -165\ 338$ | $Q_{2233} = -379\ 887$ | $Q_{2333} = -25\ 369$ |
| FeO–SrO–SiO ₂ | $Q_{1123} = -240\ 990$ | $Q_{1223} = -380\ 450$ | $Q_{1233} = -201\ 502$ |

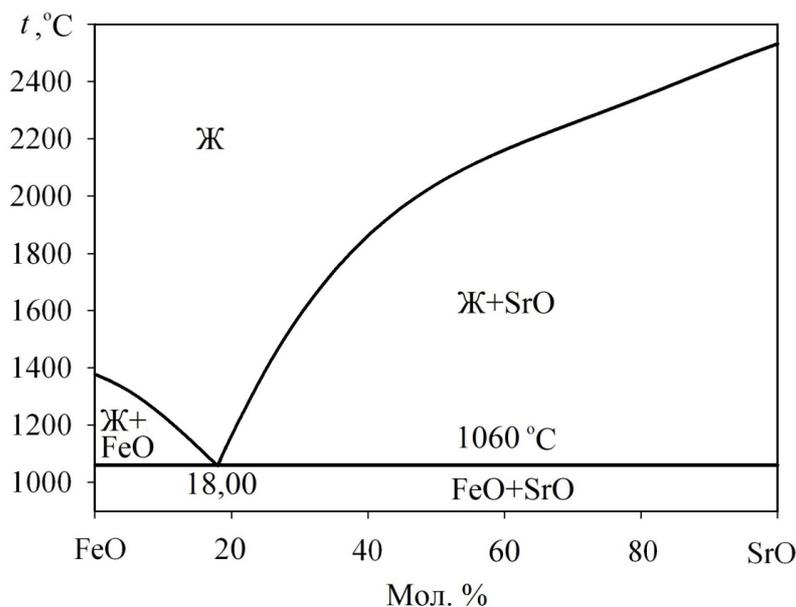


Рис. 1. Диаграмма состояния системы FeO–SrO: результаты моделирования

FeO–SrO является диаграммой эвтектического типа, при этом координаты точки эвтектики должны находиться по концентрации оксида стронция в пределах от 10 до 30 мол. % SrO, а по температуре – от 1050 до 1360 °С. Координаты расчетной точки эвтектики, полученные в ходе настоящего моделирования, соответствуют 18 мол. % SrO и 1060 °С (см. рис. 1).

Результаты расчета фазовых диаграмм систем FeO–SiO₂ и SrO–SiO₂ в сравнении с литературными данными приведены на рис. 2 и 3 соответственно, а также в табл. 3. На рис. 4

приведены результаты расчета активности оксида железа согласно теории субрегулярных ионных растворов при 1600 °С в расплаве системы FeO–SiO₂.

Согласованность полученных в ходе настоящей работы результатов с имеющимися литературными данными по двойным оксидным системам подтверждает адекватность выбранной термодинамической модели и проведенных расчетов.

Полученные в ходе настоящего исследования сведения по температурам, энтальпиям

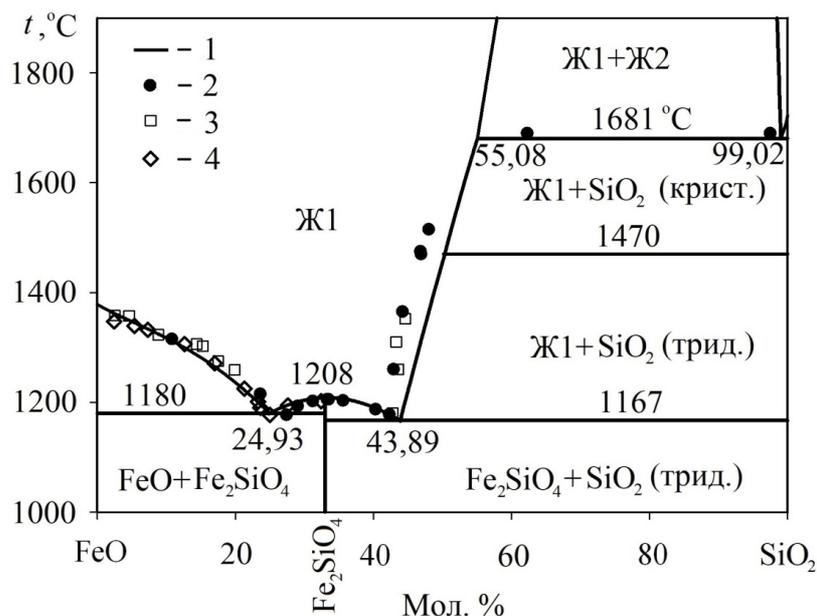


Рис. 2. Диаграмма состояния системы FeO–SiO₂: 1 – результаты моделирования; 2 – экспериментальные данные N.L. Bowen и J.F. Schairer [15]; 3 – экспериментальные данные R. Schuhmann и P.J. Ensio [16]; 4 – экспериментальные данные W.C. Allen и R.B. Snow [17]. Здесь и далее трид. – тридимит, крист. – кристобалит

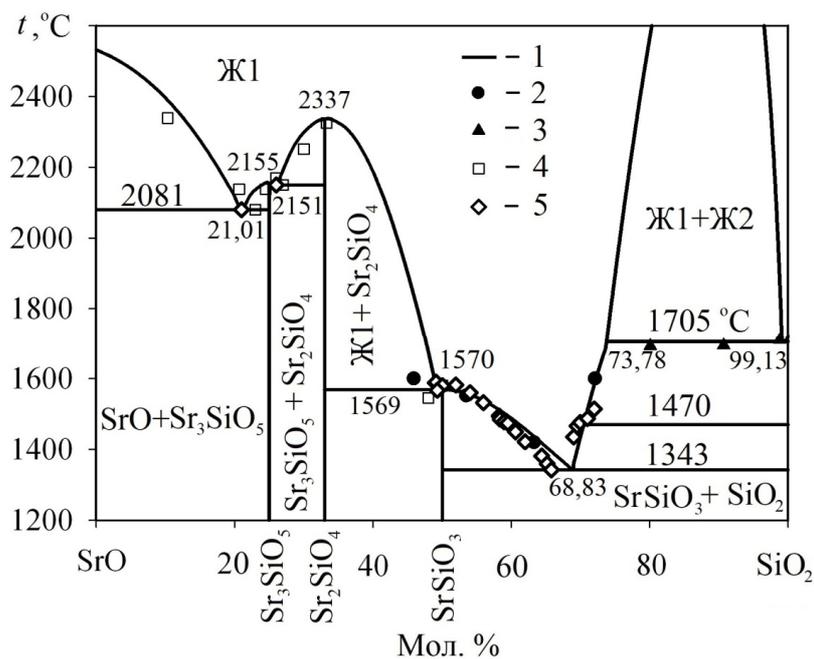


Рис. 3. Диаграмма состояния системы SrO–SiO₂: 1 – результаты моделирования; 2 – экспериментальные данные P. Eskola [19]; 3 – экспериментальные данные J.W. Greig [20]; 4 – экспериментальные данные J.M. Fields et al. [21]; 5 – экспериментальные данные M.E. Huntelaar et al. [22]

Таблица 3

Координаты точек невариантных равновесий в системах FeO–SiO₂ и SrO–SiO₂

| Равновесие | Координаты | | Источник |
|--|-------------------------|-------|--------------------|
| | Мол. % SiO ₂ | t, °C | |
| Система FeO–SiO ₂ | | | |
| Ж1 ↔ FeO + Fe ₂ SiO ₄ | 27,40 | 1177 | [15] |
| | 25,00 | 1177 | [17] |
| | 25,30 | 1183 | [18] |
| | 24,93 | 1180 | [настоящая работа] |
| Ж1 ↔ Fe ₂ SiO ₄ + SiO ₂ (трид.) | 42,30 | 1178 | [15] |
| | 42,80 | 1180 | [16] |
| | 41,00 | 1185 | [18] |
| | 43,89 | 1167 | [настоящая работа] |
| Ж2 ↔ Ж1 + SiO ₂ (крисст.) | 62,30 | 1690 | [15] |
| | 97,50 | 1690 | |
| | 58,00 | 1685 | [18] |
| | 98,60 | 1685 | |
| | 55,08 | 1681 | [настоящая работа] |
| | 99,02 | 1681 | |
| Система SrO–SiO ₂ | | | |
| Ж1 ↔ SrO + Sr ₃ SiO ₅ | 23,00 | 2080 | [21] |
| | 23,00 | 2080 | [22] |
| | 21,01 | 2081 | [настоящая работа] |
| Ж1 ↔ Sr ₃ SiO ₅ + Sr ₂ SiO ₄ | 27,00 | 2150 | [21] |
| | 27,00 | 2150 | [22] |
| | 26,00 | 2151 | [настоящая работа] |
| Ж1 ↔ Sr ₂ SiO ₄ + SrSiO ₃ | 47,60 | 1545 | [19] |
| | 48,00 | 1545 | [21] |
| | 49,30 | 1567 | [22] |
| | 49,28 | 1569 | [настоящая работа] |
| Ж1 ↔ SrSiO ₃ + SiO ₂ (трид.) | 66,50 | 1358 | [19] |
| | 65,80 | 1342 | [22] |
| | 68,83 | 1343 | [настоящая работа] |
| Ж2 ↔ Ж1 + SiO ₂ (крисст.) | 80,10 | 1694 | [20] |
| | 98,80 | 1694 | |
| | 73,78 | 1705 | [настоящая работа] |
| | 99,13 | 1705 | |

и энтропиям образования силикатов из компонентов оксидного расплава приведены в табл. 4. Сравнительный анализ показывает, что энтальпии образования силикатов стронция в два-три раза превышают энтальпию образования силиката железа.

На рис. 5 представлены результаты моделирования поверхности ликвидус для системы FeO–SrO–SiO₂. На диаграмму нанесены изотермы в интервале температур 1200–2400 °C с шагом в двести градусов. В табл. 5 приведены координаты точек невариантных превращений в данной системе.

Диаграмма состояния системы FeO–SrO–SiO₂ характеризуется обширными областями равновесия оксидного расплава с силикатами SrSiO₃ и Sr₂SiO₄, а также с оксидом стронция. Это необходимо учитывать при планировании составов, принадлежащих данной системе, так как, например, соединение Sr₂SiO₄ является тугоплавким (см. рис. 3 и табл. 4) и при попадании составов в область равновесия с этим силикатом температура плавления (температура на поверхности ликвидус) может составить достаточно высокие значения вплоть до 2337 °C.

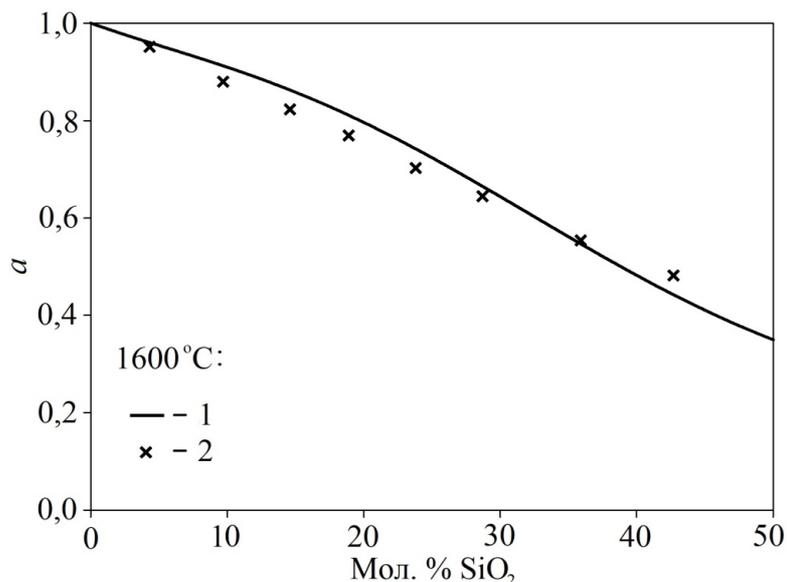


Рис. 4. Активность оксида железа FeO в расплаве системы FeO–SiO₂ при 1600 °С: 1 – результаты расчета; 2 – литературные данные P.L. Lin и A.D. Pelton [23]

Таблица 4

Данные о температурах, энтальпиях и энтропиях образования силикатов из компонентов оксидного расплава

| Соединение | Температура, °С | Энтальпия, Дж/моль | Энтропия, Дж/(моль·К) |
|----------------------------------|-----------------|--------------------|-----------------------|
| Fe ₂ SiO ₄ | 1208 | 63 600 | 26,955 |
| Sr ₃ SiO ₅ | 2155 | 181 675 | 4,902 |
| Sr ₂ SiO ₄ | 2337 | 169 576 | 8,040 |
| SrSiO ₃ | 1570 | 155 697 | 34,267 |

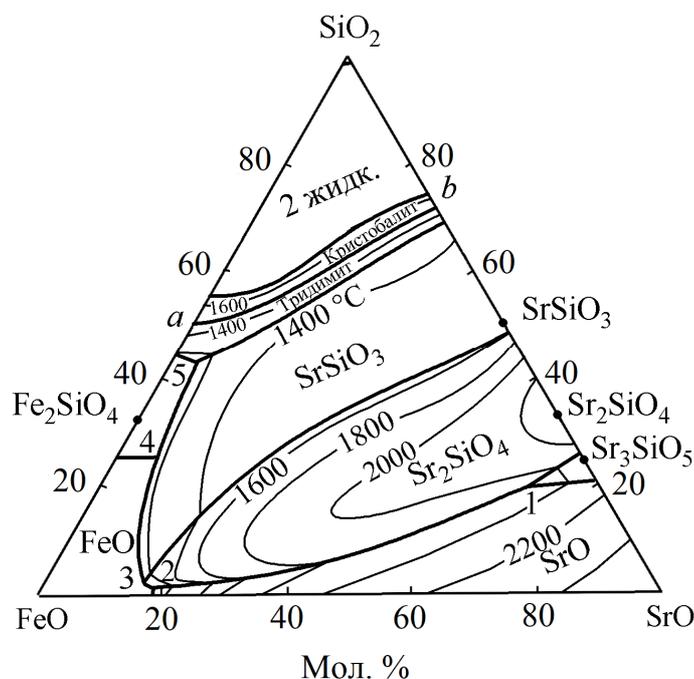


Рис. 5. Результаты моделирования проекции поверхности ликвидус для системы FeO–SrO–SiO₂. Линия *ab* соответствует границе фазового перехода оксида кремния из тридимита в кристобалит при 1470 °С. Координаты точек 1–5 приведены в табл. 5

Таблица 5

Координаты точек неинвариантных превращений
в системе FeO–SrO–SiO₂ (см. рис. 5)

| № точки | <i>t</i> , °C | FeO, мол. % | SrO, мол. % | SiO ₂ , мол. % |
|---------|---------------|-------------|-------------|---------------------------|
| 1 | 1880 | 12,14 | 68,81 | 19,05 |
| 2 | 1058 | 81,27 | 18,18 | 0,55 |
| 3 | 1111 | 82,06 | 15,91 | 2,03 |
| 4 | 1111 | 68,05 | 6,26 | 25,69 |
| 5 | 1124 | 52,73 | 4,40 | 42,87 |

Следует отметить, что в литературе нет сведений о диаграмме состояния системы FeO–SrO–SiO₂ и результаты, полученные в ходе настоящей работы, представлены впервые.

Выводы

Выполнено термодинамическое моделирование диаграмм состояния двойных оксидных систем FeO–SrO, FeO–SiO₂, SrO–SiO₂, и на основании полученных данных построена проекция поверхности ликвидус диаграммы состояния тройной оксидной системы FeO–SrO–SiO₂. Полученные результаты показали хорошую сходимость с литературными данными. Показана адекватность используемой при расчете активностей компонентов оксидного расплава теории субрегулярных ионных растворов. Диаграмма состояния тройной оксидной системы FeO–SrO–SiO₂ характеризуется обширными областями равновесия оксидного расплава с силикатами SrSiO₃ и Sr₂SiO₄, а также с оксидом стронция. Это необходимо учитывать при планировании составов, принадлежащих данной тройной оксидной системе, так как силикат стронция Sr₂SiO₄ и оксид стронция SrO являются тугоплавкими.

Литература

1. Zhang, G.H. Correlation between viscosity and electrical conductivity of aluminosilicate melts / G.H. Zhang, K.C. Chou // *Metallurgical and Materials Transactions B*. – 2012. – Vol. 43B, no. 4. – P. 849–855. DOI: 10.1007/s11663-012-9674-y

2. Tang, K. Thermodynamic evaluation of Sr-containing Si metals and silicate melts for Si–Sr alloy production / K. Tang, L.K. Jakobsson, K. Hildal // *The Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy*. – 2018. – Vol. 118. – P. 601–605. DOI: 10.17159/2411-9717/2018/v118n6a7

3. Use barium–strontium modifier in manufacturing welding flux based on silicomanganese slag for welding and surfacing mining equipment / N.A. Kozyrev, A.R. Mikhno, R.E. Kryukov et al. // *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. – 2018. – Vol. 206. – P. 012033. DOI: 10.1088/1755-1315/206/1/012033

4. Синтез магнеторезистивных стекло-керамических композитов в системе SrO–MnO_x–SiO₂–La₂O₃ / С.Е. Кушнир, А.В. Васильев, Д.Д. Зайцев и др. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. – 2008. – № 1. – С. 38–41.

5. Влияние добавок В₂O₃ и Р₂O₅ на кристаллизационную способность стронций-алюмосиликатного стекла / Н.Е. Щеголева, Д.В. Граценков, П.Д. Саркисов и др. // *Техника и технология силикатов*. – 2012. – Т. 19, № 2. – С. 2–7.

6. Preparation and characterization of SrO–Na₂O–Fe₂O₃–FeO–P₂O₅–SiO₂ ferrimagnetic glass-ceramics for hyperthermia application / J.A. Liu, X. Yang, M.M. Zhang, W. He // *Advanced Materials Research*. – 2012. – Vols. 557–559. – P. 1612–1617. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMR.557-559.1612

7. Михайлов, Г.Г. Термодинамика металлургических процессов и систем / Г.Г. Михайлов, Б.И. Леонович, Ю.С. Кузнецов. – М.: Издат. Дом МИСиС, 2009. – 520 с.

8. Термодинамическое моделирование поверхности ликвидус диаграммы состояния системы SiO₂–Al₂O₃–ZrO₂ / О.В. Самойлова, Г.Г. Михайлов, Л.А. Макровец и др. // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия»*. – 2015. – Т. 15, № 4. – С. 15–21. DOI: 10.14529/met150402

9. Самойлова, О.В. Термодинамическое моделирование фазовой диаграммы системы SiO₂–Na₂O–K₂O / О.В. Самойлова, Л.А. Макровец, Е.А. Трофимов // *Вестник Московского университета. Серия 2: Химия*. – 2018. – Т. 59, № 3. – С. 196–204.

10. Кубашевский, О. *Металлургическая*

термохимия / О. Кубаиевский, С.Б. Олкокк. – М.: Металлургия, 1982. – 392 с.

11. 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.

12. 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.

13. Физико-химические свойства окислов: справочник / Г.В. Самсонов, А.Л. Борисова, Т.Г. Жидкова и др.; под. ред. Г.В. Самсонова. – М.: Металлургия, 1978. – 471 с.

14. Revzin, B. Model evaluations of phase diagrams of the systems SrO–(Mn, Fe, Co, Ni)O / B. Revzin, J. Pelleg // *Materials Research Society Symposium Proceedings*. – 1996. – Vol. 398. – P. 649–654.

15. Bowen, N.L. The system, FeO–SiO₂ / N.L. Bowen, J.F. Schairer // *American Journal of Science*. – 1932. – Vol. XXIV, no. 141. – P. 177–213.

16. Schuhmann, R. Thermodynamics of iron-silicate slags: slags saturated with gamma iron / R. Schuhmann, P.J. Ensis // *Transactions AIME. Journal of Metals*. – 1951. – No. 3. – P. 401–411.

17. Allen, W.C. The orthosilicate – iron ox-

ide portion of the system CaO–“FeO”–SiO₂ / W.C. Allen, R.B. Snow // *Journal of the American Ceramic Society*. – 1955. – Vol. 38, no. 8. – P. 264–280.

18. Romero-Serrano, A. Thermodynamic analysis of binary and ternary silicate systems by a structural model / A. Romero-Serrano, A.D. Pelton // *ISIJ International*. – 1999. – Vol. 39, no. 5. – P. 399–408. DOI: 10.2355/isijinternational.39.399

19. Eskola, P. The silicates of strontium and barium / P. Eskola // *American Journal of Science*. – 1922. – Vol. IV, no. 23. – P. 331–375.

20. Greig, J.W. Immiscibility in silicate melts / J.W. Greig // *American Journal of Science*. – 1927. – Vol. XIII, no. 73. – P. 1–44.

21. Fields, J.M. Phase equilibria in the system BaO–SrO–SiO₂ / J.M. Fields, P.S. Dear, J.J. Brown // *Journal of the American Ceramic Society*. – 1972. – Vol. 55, no. 12. – P. 585–588.

22. Huntelaar, M.E. Phase relations in the SrO–SiO₂–ZrO₂ system. I. The system SrO–SiO₂ / M.E. Huntelaar, E.H.P. Cordfunke, A. Scheele // *Journal of Alloys and Compounds*. – 1993. – Vol. 191, no. 1. – P. 87–90. DOI: 10.1016/0925-8388(93)90276-S

23. Lin, P.L. A structural model for binary silicate systems / P.L. Lin, A.D. Pelton // *Metallurgical Transactions B*. – 1979. – Vol. 10B, no. 4. – P. 667–675. DOI: 10.1007/BF02662569

Самойлова Ольга Владимировна, канд. хим. наук, старший научный сотрудник кафедры материаловедения и физико-химии материалов, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; samoilovaov@susu.ru.

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

Бакин Игорь Валерьевич, аспирант кафедры материаловедения и физико-химии материалов, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; igor.npp.bakin@gmail.com.

Поступила в редакцию 8 октября 2019 г.

THERMODYNAMIC SIMULATION OF PHASE EQUILIBRIA IN OXIDE SYSTEM FeO–SrO–SiO₂

O.V. Samoylova, samoilovaov@susu.ru,

L.A. Makrovets, makrovetcla@susu.ru,

I.V. Bakin, igor.npp.bakin@gmail.com

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

Oxide systems with strontium oxide as one of the main components are used more and more widely in different industries. The effect of adding SrO on slug, flux, and the properties of glass and even ceramic with magnetic behaviour is intensively studied today. However, there is only a limited amount of data on phase diagrams for oxide strontium-bearing systems in academic literature, in particular for triple and multi-component systems. This research involved a thermodynamic simulation of phase equilibria and further construction of phase diagrams for double oxide systems FeO–SrO, FeO–SiO₂, SrO–SiO₂, and the calculation of coordinates of the liquidus surface projection of the phase diagram for a triple oxide system FeO–SrO–SiO₂. The simulation was conducted using the sub-regular ionic solution theory approximation. The study has identified energy parameters of the theory for every of the researched systems. The estimated data on the position of liquidus lines in double oxide systems are comparable to those published in academic literature, thus confirming that the performed simulation is correct. Information on the phase diagram of the triple oxide system FeO–SrO–SiO₂ is not presented in the academic literature and have been calculated for the first time. The present paper also analyses the data on the temperatures, enthalpy and entropy of silicate formation Fe₂SiO₄, Sr₃SiO₅, Sr₂SiO₄, SrSiO₃ from the components of oxide melt of systems FeO–SiO₂ and SrO–SiO₂ respectively. For example, in the case of Fe₂SiO₄, the enthalpy of the compound formation from the components of the oxide melt was 63600 J/mol; in case of the silicate Sr₃SiO₅ – 181675 J/mol; in case of the compound Sr₂SiO₄ – 169576 J/mol; and for SrSiO₃ – 155697 J/mol.

Keywords: FeO–SrO–SiO₂ system, thermodynamic simulation, phase equilibria, phase diagrams.

References

1. Zhang G.H., Chou K.C. Correlation between Viscosity and Electrical Conductivity of Alumino-silicate Melts. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2012, vol. 43B, no. 4, pp. 849–855. DOI: 10.1007/s11663-012-9674-y
2. 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
3. Kozyrev N.A., Mikhno A.R., Kryukov R.E., Yakushevich N.F., Provodova A.A. Use Barium–Strontium Modifier in Manufacturing Welding Flux Based on Silicomanganese Slag for Welding and Surfacing Mining Equipment. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 2018, vol. 206, pp. 012033. DOI: 10.1088/1755-1315/206/1/012033
4. Kushnir S.E., Vasil'ev A.V., Zaitsev D.D., Kazin P.E., Tret'yakov Yu.D. Synthesis of Magnetoresistive Glass–Ceramic Composites in the SrO–MnO_x–SiO₂–La₂O₃ System. *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2008, vol. 2, no. 1, pp. 34–36. DOI: 10.1007/s11700-008-1005-1
5. Shchegoleva N.E., Grashchenkov D.V., Sarkisov P.D., Orlova L.A., Popovich N.V. The Effect of B₂O₃ and P₂O₅ Additives on the Crystallization Ability of Strontium Aluminosilicate Glass. *Technique and Technology of Silicates*, 2012, vol. 19, no. 2, pp. 2–7. (in Russ.)
6. Liu J.A., Yang X., Zhang M.M., He W. Preparation and Characterization of SrO–Na₂O–Fe₂O₃–FeO–P₂O₅–SiO₂ Ferrimagnetic Glass-Ceramics for Hyperthermia Application. *Advanced Materials Research*, 2012, vols. 557–559, pp. 1612–1617. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMR.557-559.1612
7. 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. (in Russ.)

8. Samoylova O.V., Mikhailov G.G., Makrovets L.A., Trofimov E.A., Sidorenko A.Yu. Thermodynamic Modeling of Liquidus Surface of the Phase Diagram of $\text{Cu}_2\text{O}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{ZrO}_2$ System. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Metallurgy*, 2015, vol. 15, no. 4, pp. 15–21. (in Russ.) DOI: 10.14529/met150402

9. Samoiloa O.V., Makrovets L.A., Trofimov E.A. Thermodynamic Simulation of the Phase Diagram of the $\text{Cu}_2\text{O}-\text{Na}_2\text{O}-\text{K}_2\text{O}$ System. *Moscow University Chemistry Bulletin*, 2018, vol. 73, no. 3, pp. 105–110. DOI: 10.3103/S0027131418030057

10. Kubaschewski O., Alcock C.B. *Metallurgical Thermochemistry*. Oxford, Pergamon Press Ltd Publ., 1979. 392 p.

11. 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.

12. 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.)

13. Samsonov G.V. *Fiziko-khimicheskie svoystva okislov* [Physico-Chemical Properties of Oxides]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1978, 471 p. (in Russ.)

14. Revzin B., Pelleg J. Model Evaluations of Phase Diagrams of the Systems $\text{SrO}-(\text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni})\text{O}$. *Materials Research Society Symposium Proceedings*, 1996, vol. 398, pp. 649–654.

15. Bowen N.L., Schairer J.F. The System, $\text{FeO}-\text{SiO}_2$. *American Journal of Science*, 1932, vol. XXIV, no. 141, pp. 177–213.

16. Schuhmann R., Ensio P.J. Thermodynamics of Iron-Silicate Slags: Slags Saturated with Gamma Iron. *Transactions AIME. Journal of Metals*, 1951, no. 3, pp. 401–411.

17. Allen W.C., Snow R.B. The Orthosilicate – Iron Oxide Portion of the System $\text{CaO}-\text{FeO}-\text{SiO}_2$. *Journal of the American Ceramic Society*, 1955, vol. 38, no. 8, pp. 264–280.

18. Romero-Serrano A., Pelton A.D. Thermodynamic Analysis of Binary and Ternary Silicate Systems by a Structural Model. *ISIJ International*, 1999, vol. 39, no. 5, pp. 399–408. DOI: 10.2355/isijinternational.39.399

19. Eskola P. The Silicates of Strontium and Barium. *American Journal of Science*, 1922, vol. IV, no. 23, pp. 331–375.

20. Greig J.W. Immiscibility in Silicate Melts. *American Journal of Science*, 1927, vol. XIII, no. 73, pp. 1–44.

21. Fields J.M., Dear P.S., Brown J.J. Phase Equilibria in the System $\text{BaO}-\text{SrO}-\text{SiO}_2$. *Journal of the American Ceramic Society*, 1972, vol. 55, no. 12, pp. 585–588.

22. Huntelaar M.E., Cordfunke E.H.P., Scheele A. Phase Relations in the $\text{SrO}-\text{SiO}_2-\text{ZrO}_2$ System. I. The System $\text{SrO}-\text{SiO}_2$. *Journal of Alloys and Compounds*, 1993, vol. 191, no. 1, pp. 87–90. DOI: 10.1016/0925-8388(93)90276-S

23. Lin P.L., Pelton A.D. A Structural Model for Binary Silicate Systems. *Metallurgical Transactions B*, 1979, vol. 10B, no. 4, pp. 667–675. DOI: 10.1007/BF02662569

Received 8 October 2019

ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Самойлова, О.В. Термодинамическое моделирование фазовых равновесий в оксидной системе $\text{FeO}-\text{SrO}-\text{SiO}_2$ / О.В. Самойлова, Л.А. Макровец, И.В. Бакин // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2019. – Т. 19, № 4. – С. 10–18. DOI: 10.14529/met190402

FOR CITATION

Samoylova O.V., Makrovets L.A., Bakin I.V. Thermodynamic Simulation of Phase Equilibria in Oxide System $\text{FeO}-\text{SrO}-\text{SiO}_2$. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Metallurgy*, 2019, vol. 19, no. 4, pp. 10–18. (in Russ.) DOI: 10.14529/met190402