DOI: 10.17117/na.2016.06.02.027

<http://ucom.ru/doc/na.2016.06.02.027.pdf>

Поступила (Received): 15.06.2016

Богатов М.В., Кондратьева Л.А.
Интерпретация термодинамических расчетов систем
«азид натрия – галогениды кремния и бора»

Bogatov M.V., Kondratieva L.A.
Interpretation of thermodynamic calculations systems
"Sodium azide – silicon and boron halides"

Приведена интерпретация термодинамических расчетов исходных систем для синтеза нитридной композиции Si_3N_4 -BN в системе «азид натрия – галогениды кремния (K_2SiF_6) и бора (KBF_4 или $NaBF_4$)»

Shows the interpretation of thermodynamic calculations of the original systems for the synthesis of nitride composition Si_3N_4 -BN in system "Sodium azide – silicon (K_2SiF_6) and boron (KBF_4 или $NaBF_4$) halides"

Ключевые слова: CBC, нитриды, азид натрия, галоидная соль

Key words: SHS, nitrides, sodium azide, halides

Богатов Максим Валерьевич

Студент

Самарский государственный технический университет

г. Самара, ул. Молодогвардейская, 133

Bogatov Maxim Valerievich

Student

Samara state technical university

Samara, Molodogvardeiskaya st., 133

Кондратьева Людмила Александровна

Кандидат технических наук, доцент

Самарский государственный технический университет

г. Самара, ул. Молодогвардейская, 133

Kondratieva Lyudmila Aleksandrovna

Candidate of Technical Sciences, Associate Professor

Samara state technical university

Samara, Molodogvardeiskaya st., 133

Расчёт температуры горения проводится в предположении отсутствия теплотер и с учетом полного превращения исходных компонентов в конечные продукты синтеза. Основным условием для определения температуры горения является равенство энтальпий (тепловых балансов) исходных веществ при начальной температуре T_0 и конечных продуктов при температуре $T_{ад}$. Это означает, что всё выделившееся при реакции тепло идёт на нагрев продуктов горения от начальной температуры до температуры горения.

Термодинамический анализ возможности синтеза целевых тугоплавких продуктов проводился на ЭВМ по компьютерной программе «Thermo». Программа «Thermo» разработана для осуществления расчетов термодинамиче-

ского равновесия в сложных многоэлементных гетерофазных системах и предназначена для использования в задачах анализа возможного состава неорганических продуктов синтеза при расчетах адиабатической температуры горения системы.

По результатам термодинамических расчетов строились зависимости максимальных адиабатических температур горения, равновесных составов продуктов синтеза от соотношения компонентов в системе, при котором проводилась химическая реакция. Расчеты по определению равновесных концентраций продуктов синтеза проводились с учетом давления газа 4 МПа.

Термодинамический расчет по образованию композиции $\text{Si}_3\text{N}_4\text{-BN}$ проводился при исследовании стехиометрических уравнений реакций CBC:

увеличение в смеси компонента K_2SiF_6 :

увеличение в смеси компонента KBF_4 :

увеличение в смеси компонента K_2SiF_6 :

увеличение в смеси компонента NaBF_4 :

На рисунке 1 представлены графические зависимости равновесных концентраций продуктов синтеза, температуры реакции и теплового баланса системы « $x\text{K}_2\text{SiF}_6\text{-NaN}_3\text{-yKBF}_4$ » от содержания в ней $x_{\text{K}_2\text{SiF}_6}$ и y_{KBF_4} .

Из рисунков 1а и 1в видно, что с ростом содержания K_2SiF_6 в системе « $x\text{K}_2\text{SiF}_6\text{-NaN}_3\text{-KBF}_4$ » снижается адиабатическая температура реакции, но увеличиваются продукты реакции Si_3N_4 (т), NaF (ж), KF (ж) и N_2 (г). Количество BN (т), NaF (г) и KF (г) практически не изменяется. С увеличением количества K_2SiF_6 в исходной шихте тепловой баланс системы увеличивается. Из рисунков 1б и 1г видно, что с ростом содержания KBF_4 в системе « $\text{K}_2\text{SiF}_6\text{-NaN}_3\text{-yKBF}_4$ » увеличивается адиабатическая температура реакции, а также увеличиваются продукты реакции BN (т), NaF (ж), KF (ж), N_2 (г). Количество Si_3N_4 (т), NaF (г) и KF (г) не изменяется. С увеличением количества KBF_4 в исходной шихте увеличивается тепловой баланс системы.

Рис. 1. Зависимости равновесных концентраций продуктов синтеза, температуры реакции и теплового баланса системы от соотношения компонентов в системе «xK₂SiF₆-NaN₃-yKBF₄»

Из рисунков 2а и 2в видно, что с ростом содержания K₂SiF₆ в системе «xK₂SiF₆-NaN₃-NaBF₄» снижается адиабатическая температура реакции, но увеличиваются продукты реакции Si₃N₄ (т), NaF (г), KF (г) и N₂ (г). Количество BN (т), NaF (ж) и KF (ж) практически не изменяется. С увеличением количества K₂SiF₆ в исходной шихте тепловой баланс системы увеличивается. Из рисунков 2б и 2г видно, что с ростом содержания NaBF₄ в системе «K₂SiF₆-NaN₃-yNaBF₄» увеличивается адиабатическая температура реакции, а также увеличиваются продукты реакции BN (т), NaF (ж), N₂ (г). Количество Si₃N₄ (т), NaF (г) и KF (г) и KF (ж) практически не изменяется. С увеличением количества NaBF₄ в исходной шихте увеличивается тепловой баланс системы.

Рис. 2. Зависимости равновесных концентраций продуктов синтеза, температуры реакции и теплового баланса системы от соотношения компонентов в системе « $xK_2SiF_6-NaN_3-yNaBF_4$ »

Таким образом, с помощью термодинамических расчетов удалось установить, что системы СВС-Аз « $xK_2SiF_6-NaN_3-yKBF_4$ » и « $xK_2SiF_6-NaN_3-yNaBF_4$ » способны к самостоятельному горению. Температуры горения и тепловой эффект реакции (должен быть отрицательным) достаточны для образования нитридной композиции Si_3N_4-BN .