Thermodynamique des oxydes liquides simples

Alexander PISCH[1]
[1] Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMaP, F-38000 Grenoble, France

Résumé :

L'énergie de Gibbs en fonction de la température des oxydes liquides/amorphes simples ne peut généralement pas être déterminée expérimentalement. Seul pour SiO_2 et B_2O_3, certaines mesures existent (H(T)-H(298K), Cp basse température, enthalpie de cristallisation). Les fonctions pour les autres oxydes simples importants (CaO, MgO, Al_2O_3, Fe_2O_3) sont purement des estimations. Or, une description la plus précise possible pour ces oxydes simples est indispensable, car elle influence de manière importante l'énergie de Gibbs de la solution liquide multi-constituante.

Cette contribution résume les données thermodynamiques existantes dans la littérature et les bases de données commerciales (FactSage, ThermoCalc) et révèle un certain nombre de différences et inconsistances. Des nouvelles approches, tels que le « two-state model » [1] et le modèle de Golczewski [2] pour décrire l'énergie de Gibbs meta-stable du liquide seront présentées et discutées.

[1] Becker, C.A., Ågren, J., Baricco, M., Chen, Q., Decterov, S.A., Kattner, U.R., Perepezko, J.H., Pottlacher, G.R., Selleby, M., 2014. Thermodynamic modelling of liquids: CALPHAD approaches and contributions from statistical physics: Thermodynamic modelling of liquids. physica status solidi (b) 251, 33–52. https://doi.org/10.1002/pssb.201350149

[2] Golczewski, J.A., Seifert, H., Aldinger, F., 1998. A thermodynamic model of amorphous silicates. Calphad 22, 381–396.