

G7501 Fyzikální geochemie

Josef Zeman

Cvícení 03 Fázový diagram polymorfních modifikací Al_2SiO_5

Fázový diagram

Zadání:

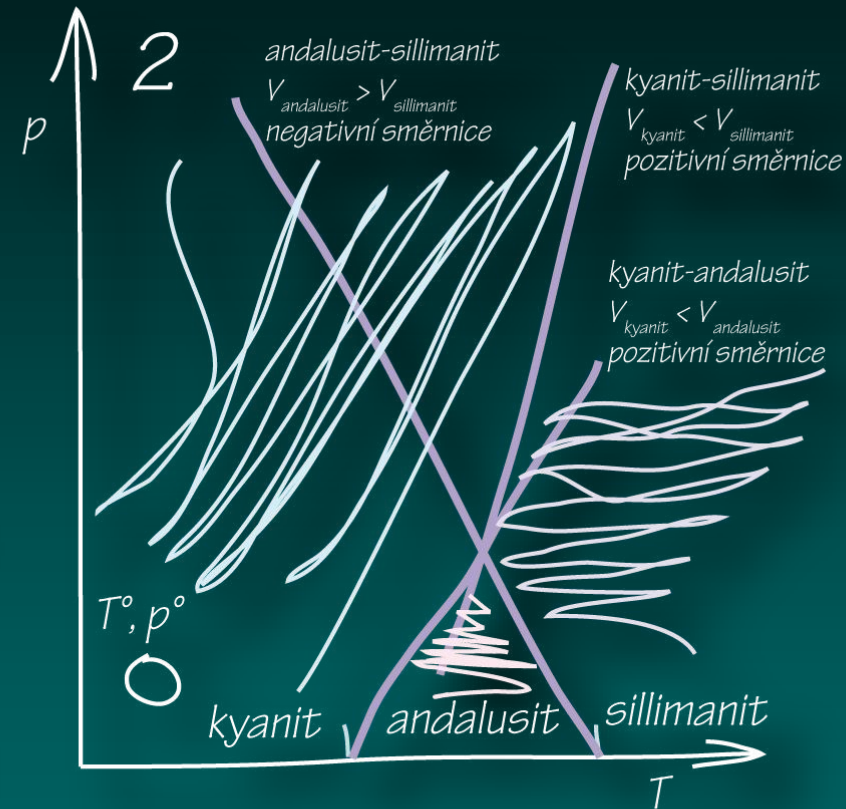
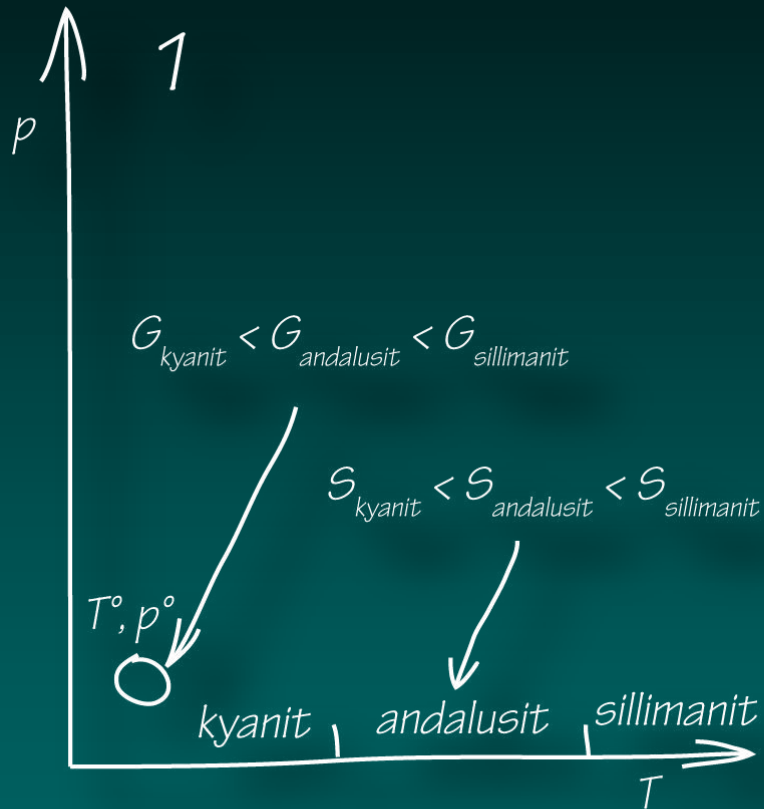
Sestrojte fázový diagram polymorfních modifikací Al_2SiO_5 (kyanit, andalusit, sillimanit). Termodynamické údaje pro jednotlivé modifikace při 25 °C a tlaku 1 bar jsou v tabulce.

	S	H	G	V	c_p
minerál	kJ/mol K	kJ/mol	kJ/mol	cm ³	kJ/mol K
kyanit	82,80	-2 593 888	-2 618 563	44,15	121,7
andalusit	91,41	-2 589 921	-2 617 161	51,52	122,7
sillimanit	95,39	-2 586 094	-2 614 521	49,86	122,6

minerál	soustava	koordinace		SPI	H
kyanit	triklinický	Al ^{VI}	Si ^{IV}	68	3,60
andalusit	kosočtverečný	Al ^{VI} Al ^{IV}	Si ^{IV}	58	3,18
sillimanit	kosočtverečný	Al ^{VI} Al ^{IV}	Si ^{IV}	63	3,23

Konstrukce fázového diagramu

Náčrtek



1. Podle rostoucích entropií musí být minerály na teplotní ose seřazeny v pořadí kyanit-andalusit-sillimanit.
2. Standardní podmínky T° a p° budou ležet v poli kyanitu, protože má za standardních podmínek nejnižší hodnotu Gibbsovy funkce.

3. Z hranic mezi minerály na ose T je možné vést fázové hranice pro rostoucí p : kyanit-andalusit s pozitivní směrnici (kyanit má menší molární objem a proto se bude pole jeho stability rozšiřovat) a andalusit-sillimanit s negativní směrnici (sillimanit má menší molární objem).
4. Vzhledem k opačným směrnici andalusit s rostoucím tlakem vymizí, směrnice kyanit-sillimanit bude pozitivní (kyanit má menší molární objem).

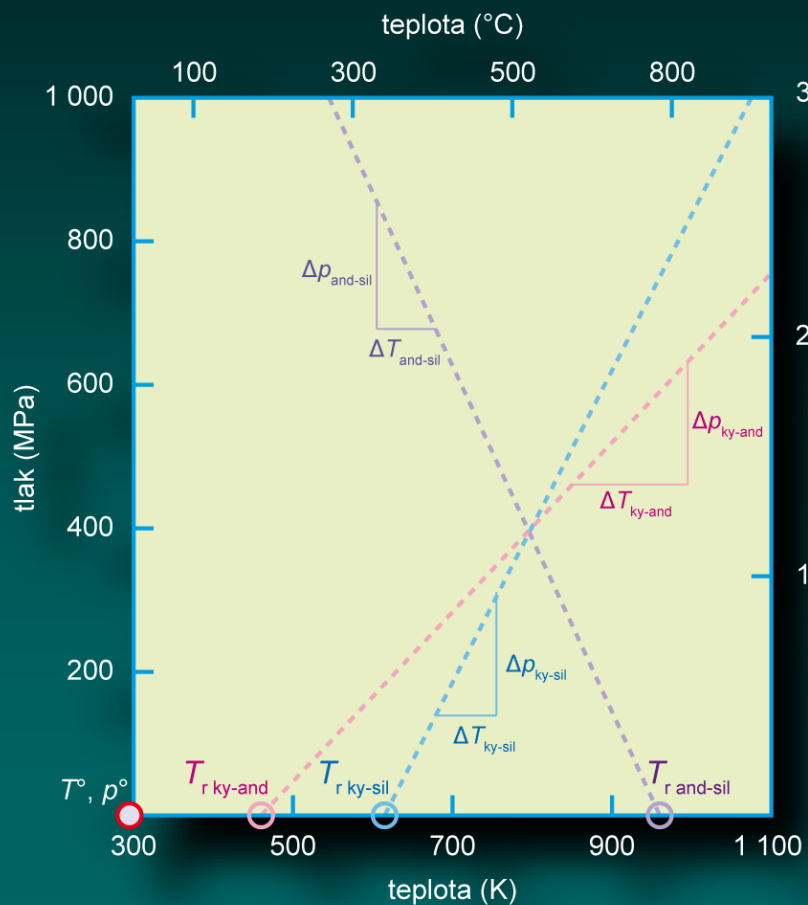
Konstrukce fázového diagramu



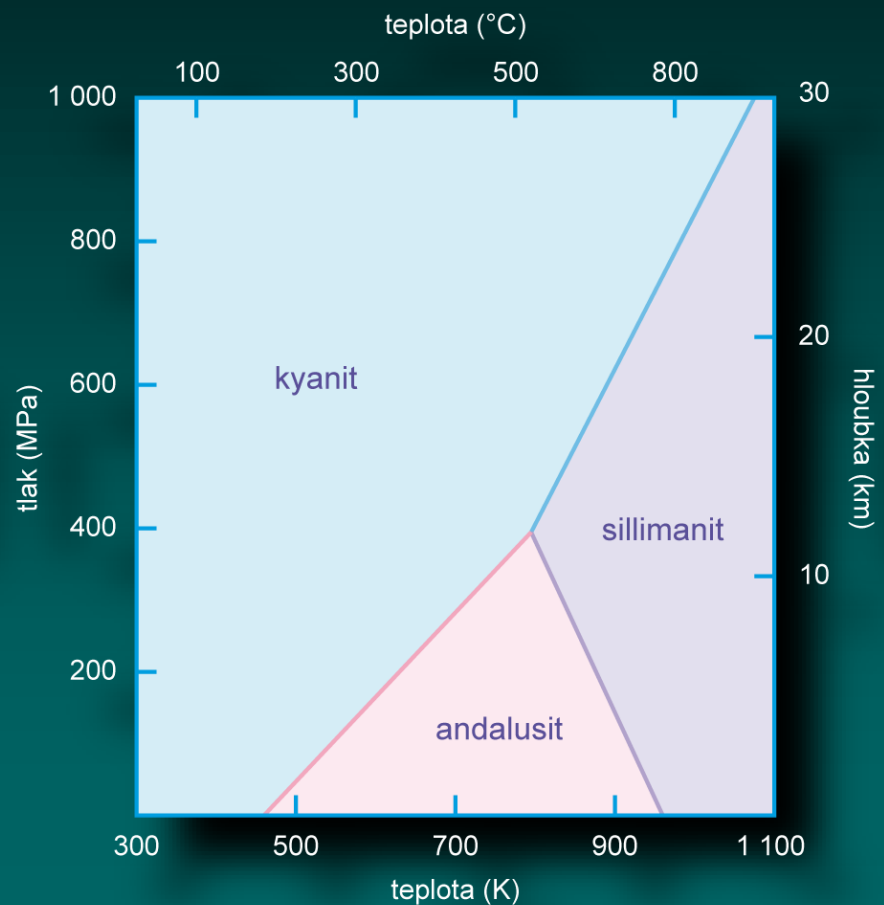
	<i>S</i>	<i>H</i>	<i>V</i>	<i>G</i>
minerál	J/mol K	J/mol	cm ³	J/mol
kyanit	82,80	-2593888	44,15	-2618563
andalusit	91,41	-2589921	51,52	-2617161
sillimanit	95,39	-2586094	49,86	-2614521
Δ kyanit-andalusit	-8,61	-3967	-7,37	-1402
Δ kyanit-sillimanit	-12,59	-7794	-5,71	-4042
Δ andalusit-sillimanit	-3,98	-3827	1,66	-2640
	T_r	dp/dT	T_r	Trojný bod
hranice	K	Pa/K	°C	$T_{\text{troj. b.}}$ (K)
kyanit-andalusit	460,7	1168250	187,6	797,5
kyanit-sillimanit	619,1	2204904	345,9	$p_{\text{troj. b.}}$ (MPa)
andalusit-sillimanit	961,6	-2397590	688,4	393,5

Konstrukce fázového diagramu

linie a pole

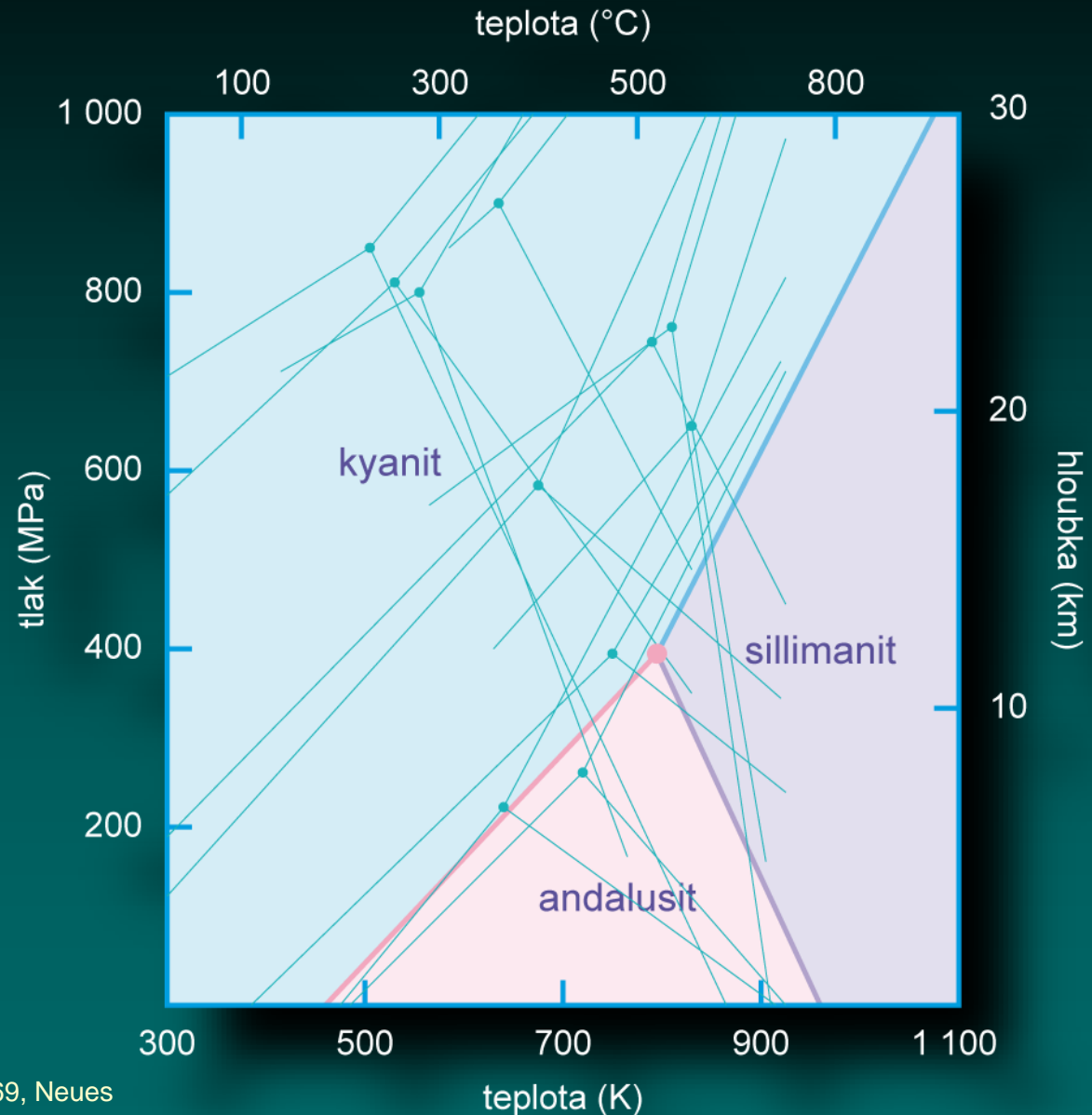


výsledný diagram



Konstrukce fázového diagramu

Porovnání výpočtu s experimentálně zjištěnými hodnotami.



Experimentální line podle: E. Althaus, 1969, Neues Jahrbuch für Mineralogie 111