

## Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 544.344.3+546.831.4

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2021.23/3529>

### 3D компьютерная модель $T$ - $x$ - $y$ диаграммы $\text{CaO-MgO-Al}_2\text{O}_3$ при температурах выше 1300 °С

В. П. Воробьева, А. Э. Зеленая✉, В. И. Луцык, М. В. Ламуева

Институт физического материаловедения Сибирского отделения РАН,  
ул. Сахьяновой, 6, Улан-Удэ 670047, Российская Федерация

#### Аннотация

Проведен анализ противоречий по способу образования и характеру плавления соединений в двойной системе  $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3$ , а именно: возможно ли в принципе существование соединения 12:7 и являются ли соединения 1:1 и 1:2 конгруэнтно либо инконгруэнтно плавящимися. Также обсуждаются возможности образования в тройной системе  $\text{CaO-MgO-Al}_2\text{O}_3$  соединений: только одного 3:1:1 либо, кроме него, еще двух 1:2:8 и 2:2:14. Для наиболее общего варианта – с шестью бинарными и тремя тройными соединениями – построена 3D компьютерная модель  $T$ - $x$ - $y$  диаграммы. Ее высокотемпературная часть – выше 1300 °С – состоит из 234 поверхностей и 85 фазовых областей; тройные соединения образуются по трем перитектическим реакциям, кроме них в системе имеют место шесть квазиперитектических и три эвтектических неинвариантных реакции с участием расплава. Принцип построения трехмерной модели – постепенный переход от схемы фазовых реакций (трансформированной в схему моно- и неинвариантных состояний) в табличном и затем в графическом (наброску линейчатых поверхностей и изотермических плоскостей, соответствующих неинвариантным реакциям) виде к прототипу (графической схеме всех поверхностей ликвидуса, солидуса, сольвуса)  $T$ - $x$ - $y$  диаграммы. Завершает конструирование трансформация прототипа в 3D модель реальной системы после ввода координат (составов и температур) базовых точек и коррекции кривизны линий и поверхностей. Готовая модель имеет широкие возможности визуализации фазовой диаграммы, включая построение любых произвольно заданных изо- и политермических сечений. Для построения 3D модели использовалась авторская программа PD Designer (Конструктор Фазовых Диаграмм). Для оценки качества 3D модели проведено сравнение двух вариантов изотермического разреза при 1840 °С: модельного и фрагмента экспериментального сечения вблизи  $\text{Al}_2\text{O}_3$ .

**Ключевые слова:** фазовая диаграмма, компьютерное моделирование, оксиды кальция, магния, алюминия

**Благодарности:** исследование выполнено в соответствии с госзаданием ФГБУН ИФМ СО РАН на 2017-2020 гг. (проект № 0336-2019-0008) и при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-38-90035 аспиранты.

**Для цитирования:** Воробьева В. П., Зеленая А. Э., Луцык В. И., Ламуева М. В. 3D компьютерная модель  $T$ - $x$ - $y$  диаграммы  $\text{CaO-MgO-Al}_2\text{O}_3$  при температурах выше 1300 °С. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2021;23(3): 380–386. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2021.23/3529>

**For citation:** V. P. Vorob'eva, A. E. Zelenaya, V. I. Lutsyk, M. V. Lamueva. A 3D computer model of the  $\text{CaO-MgO-Al}_2\text{O}_3$   $T$ - $x$ - $y$  diagram at temperatures above 1300 °С. *Kondensirovannye sredy i mezhfaznye granitsy = Condensed Matter and Interphases*. 2021;23(3): 380–386. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2021.23/3529>

✉ Зеленая Анна Эдуардовна, e-mail: zel\_ann@mail.ru

© Воробьева В. П., Зеленая А. Э., Луцык В. И., Ламуева М. В., 2021



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.

## 1. Введение

Информация о фазовых превращениях в системе CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, включая области субсолидуса, важны для изучения петрологических объектов, поскольку эта система является одной из составляющих четверную систему CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub>, которая, в свою очередь, служит базой для описания минералов глубинных пород [1–2]. Кроме того, большое значение имеет прогноз и изучение свойств цементов и технической керамики на основе алюмомагнезиальной шпинели [3].

В связи с этим, несомненный интерес представляют работы, связанные как с экспериментальным изучением системы CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и термодинамическими расчетами, так и с моделированием ее T-x-у диаграммы. Однако если две формирующие ее бинарные системы – CaO-MgO и MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – трактуются однозначно, то по данным о третьей двойной системе CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, равно как и по формируемой ими тройной системе, в литературе много противоречий. Соответственно, понимание геометрического строения T-x-у диаграммы хотя бы на уровне поверхностей ликвидуса тоже затрудняется из-за многовариантности трактовки тех или иных фрагментов диаграммы.

Помощь в формальном описании T-x-у диаграммы может оказать пространственная (трехмерная – 3D) компьютерная модель фазовой диаграммы, построенная хотя бы по одному из вариантов, наиболее общему (другие, более простые, варианты затем могут быть представлены на основе этой, первой модели).

Приступая к подготовке построения 3D модели, необходимо переобозначить исходные компоненты и образующиеся в системе соединения. Таково требование программы PD Designer, с помощью которой и строятся 3D модели T-x-у фазовых диаграмм [4–6].

Итак, система CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> переобозначается как A-B-C.

Бинарная система CaO-MgO (A-B) является простой эвтектической [7–9].

По данным [10, 11] в двойной системе MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (B-C) образуется конгруэнтно плавящееся соединение 1:1 или MgO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (для 3D модели обозначено как R6), которое разбивает ее на эвтектическую MgO-MgO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (B-R6) и перитектическую MgO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R6-C) подсистемы, причем в перитектической подсистеме на линиях ликвидуса и солидуса фиксируется минимум.

Система CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (A-C) имеет достаточно спорное строение, различия касаются как количества и характера образующихся соединений, так и типа бинарных точек. Так, в работе [7] со ссылкой на [12] представлен вариант T-x диаграммы с образованием пяти соединений: 3CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R1), CaO·6Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>A (R5) – инконгруэнтного плавления и 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R2), CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R3), CaO·2Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>A (R4) – конгруэнтного плавления. Поэтому система разбивается на две эвтектические – 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R2-R3), CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-CaO·2Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R3-R4) – и две – CaO-12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (A-R2), CaO·2Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R4-C) – эвтектико-перитектические с образованием инконгруэнтно плавящихся соединений 3CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R1) и CaO·6Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R5) соответственно. Именно этот, наиболее сложный, вариант строения T-x диаграммы CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (A-C) используется для построения 3D компьютерной модели T-x-у диаграммы.

Между тем, в [13] утверждается, что соединение 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R2) является на самом деле гидратом Ca<sub>12</sub>Al<sub>14</sub>O<sub>32</sub>(OH)<sub>2</sub>, и поэтому его нельзя обнаружить в системе CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. В результате вместо пяти соединений в системе остаются четыре (без 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), причем характер плавления CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R3), CaO·2Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R4) тоже считается инконгруэнтным, как и соединений 3CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R1), CaO·6Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R5). В таком случае эти четыре соединения образуются по перитектическим реакциям, кроме того, 3CaO<sub>3</sub>·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R1) и CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R3) взаимодействуют по эвтектической реакции. Такой же вариант строения T-x диаграммы воспроизведен термодинамическими расчетами [14, 15] и подтверждается более поздними экспериментальными исследованиями [16].

В [8, 9, 17–19] на основе анализа литературных данных утверждается, что варианты строения системы CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> зависят от влажности и содержания кислорода в атмосфере печи. В зависимости от этого соединению 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> может быть приписана стехиометрия 5CaO·3Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. В таком варианте фазовой диаграммы только одно соединение – 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R2) – плавится конгруэнтно, а остальные четыре – 3CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R1), CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R3), CaO·2Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R4), CaO·6Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R5) – инконгруэнтно по четырем перитектическим реакциям. Соединение 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R2) взаимодействует с 3CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R1) и CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R3) по двум эвтектическим реакциям. Более поздние термодинамические расчеты системы CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [20] подтверждают именно этот вариант строения фазовой диаграммы. При этом авторы

подчеркивают, что в более ранних термодинамических расчетах [15] фаза 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> не рассматривалась, так как не является строго безводной. В воздухе с обычной влажностью и в температурном ряде 950–1350 °С фаза 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> абсорбирует малое количество воды (не более 1.3 вес. %) [20].

В цементных системах соединение 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> рассматривается как фаза алюмината, то есть считается безводным и включается в диаграммы [18, 19]. Соединение 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> было обнаружено, как природный минерал, и названо майонитом [21], оно имеет практическое значение при получении плотной керамики [22].

Что касается тройной системы CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, то в ранних работах [23] образование тройных соединений не фиксируется. В работе [24] обсуждается образование трех тройных соединений 3CaO·MgO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R7), CaO·2MgO·8Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R8), 2CaO·2MgO·14Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R9). При термодинамических расчетах [10] не учитывается бинарное соединение C<sub>12</sub>A<sub>7</sub>, и при этом конфигурация внутреннего поля ликвидуса, соответствующего соединению 3CaO·MgO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R7), отличается тем, что его границы формируются четырьмя невариантными точками, тогда как в [24] данное поле имеет треугольную форму.

Таким образом, целью данной работы является построение 3D компьютерной модели Т-х-у диаграммы CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, включая все ее поверхности: ликвидус, солидус, сольвус, линейчатые поверхности и горизонтальные плоскости, соответствующие невариантным превращениям в тройной системе, вплоть до температуры 1300 °С.

## 2. Моделирование

Компьютерная 3D модель Т-х-у диаграммы CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (A-B-C) построена по данным [24] с учетом образования шести бинарных 3CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R1), CaO·6Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R5) - инконгруэнтного и 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R2), CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R3), CaO·2Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R4), MgO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R6) – конгруэнтного плавления – и трех тройных 3CaO·MgO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R7), CaO·2MgO·8Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R8), 2CaO·2MgO·14Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R9) соединений (рис. 1).

Для лучшего отображения и понимания геометрического строения Т-х-у диаграммы сначала по схеме строится ее прототип, в котором составы базовых точек разнесены для удобства визуализации, но их температурные координаты заданы в соответствии с температурным рядом (рис. 1в).

Как видно из прототипа, в тройной системе выполняются три перитектические реакции образования тройных соединений:

P1: L+B+R3→R7, P2: L+R6+R9→R8,  
P3: L+R5+R6→R9,

шесть – квазиперитектических:

Q1: L+A→B+R1, Q2: L+R6→B+R3,  
Q3: L+R4→R3+R6, Q4: L+R5→R4+R9,  
Q5: L+R9→R4+R8, Q6: L+C→R5+R6

и четыре эвтектических:

E1: L→B+R1+R2, E2: L→B+R2+R7,  
E3: L→R2+R3+R7, E4: L→R4+R6+R8

невариантных реакций. Поскольку 3D модель построена в ограниченном температурном диапазоне – выше 1300 °С, то процессы, происходящие в субсолидусе, в ней не отражаются.

С помощью прототипа можно утверждать, что Т-х-у диаграмма состоит из 12-ти поверхностей ликвидуса, соответствующих началу кристаллизации трех исходных компонентов и 9-ти соединений (I = A, B, C, R1–R9), и 12-ти сопряженных с ними поверхностей солидуса, между которыми находятся двухфазные области L+I; каждая из 13-ти плоскостей-комплексов, отвечающих невариантным реакциям (трем – перитектическим P, шести – квазиперитектическим Q, четырем – эвтектическим E) разбивается на четыре симплекса; все 24 моновариантные линии ликвидуса (рис. 1г) вместе с 48-ю связанными с ними попарно линиями солидуса служат направляющими для 72-х линейчатых поверхностей – границ 24-х трехфазных областей L+I+J; соответственно, на этой высокотемпературной части диаграммы следует ожидать 24 двухфазные области I+J и 24 пары сопряженных поверхностей сольвуса; границами каждой из 13-ти трехфазных областей без расплава I+J+K служат по три линейчатые поверхности, а всего их – 39.

Таким образом, Т-х-у диаграмму образуют 234 поверхности и 85 фазовых областей (рис. 1а).

## 3. Результаты и обсуждение

Трехмерная 3D компьютерная модель конструируется путем сборки перечисленных поверхностей и фазовых областей. Сначала формируется прототип (рис. 1в), то есть в программе PD Designer строятся 13 горизонтальных (изотермических) плоскостей: 3 перитектических (P) треугольника, 6 квазиперитектических (Q) четырехугольника, 4 треугольника с включением в них точек E; затем к ним подводятся направляющие линии и формируются линейчатые

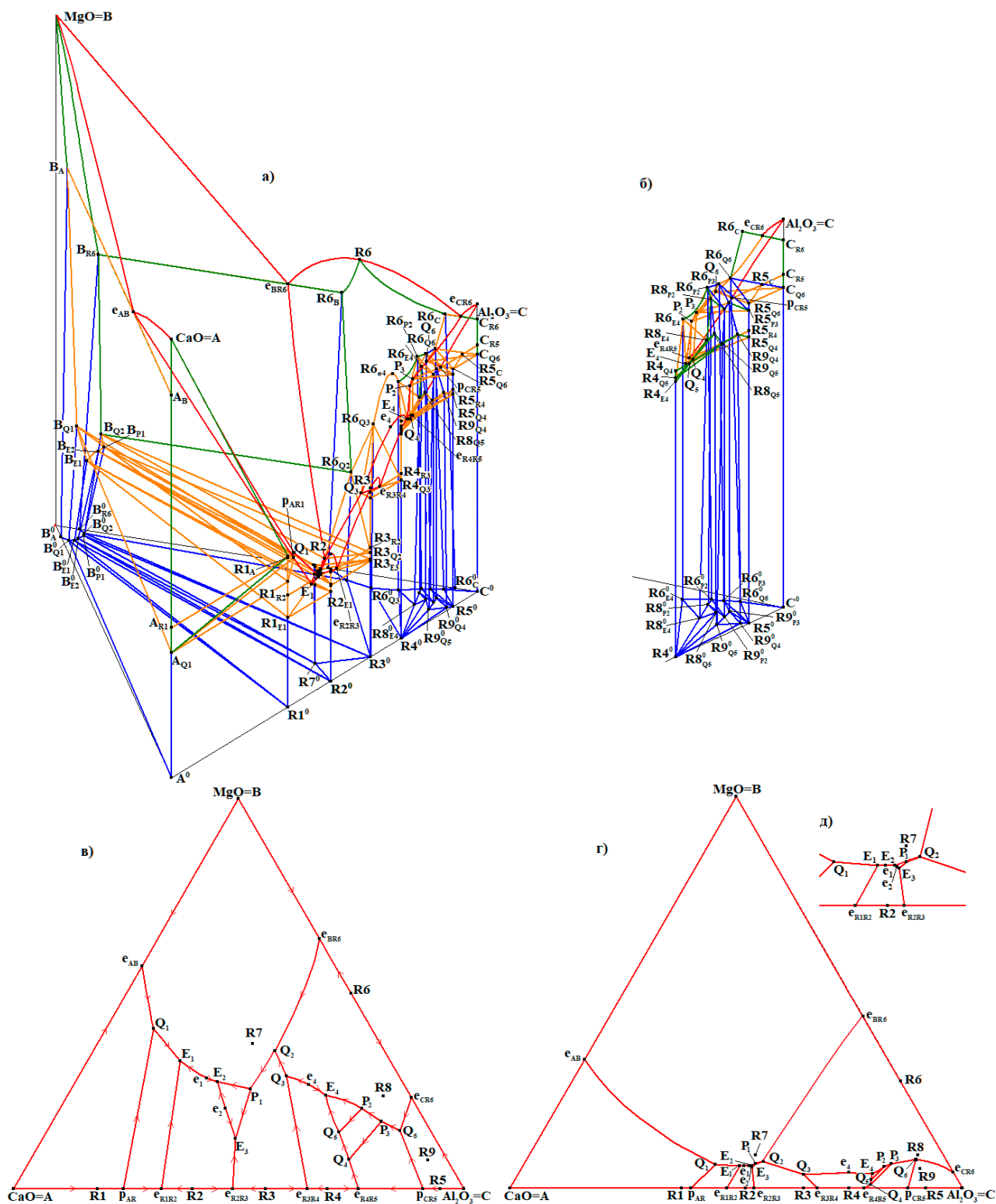


Рис. 1. 3D модель Т-х-у диаграммы CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (A-B-C) (а) и увеличенный фрагмент вблизи Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (б), х-у проекции поверхностей ликвидуса: прототипа (в), реальной системы (г) и ее увеличенный фрагмент (д)

поверхности. Так задаются границы 24-х трехфазных областей с расплавом и 13-ти – твердофазных. На полученный каркас достраиваются нелинейчатые поверхности ликвидуса, солидуса и сольвуса.

Далее прототип трансформируется в 3D модель фазовой диаграммы реальной системы. Для этого базовые точки получают реальные значения составов и температур и корректируется кривизна линий и поверхностей (рис. 1г).

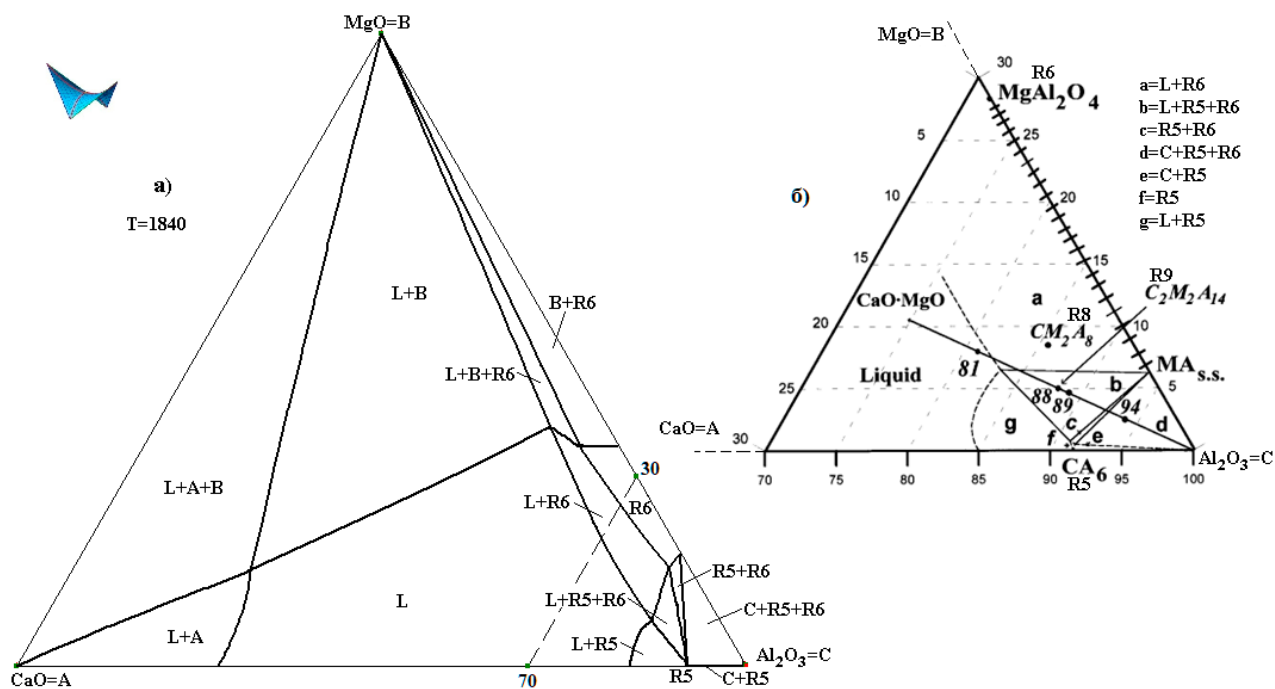
В результате получается пространственная компьютерная модель Т-х-у диаграммы, которая обладает широкими возможностями для визуализации: модель можно вращать, рассматривая в произвольных ракурсах, разбивать на фрагменты (отдельные группы фазовых областей), получать любые произвольно задаваемые разрезы.

Оценить качество полученной модели можно сравнением модельных разрезов (рис. 2а) с экспериментальными (рис. 2б). Рассматриваемый изотермический разрез при 1840 °C расположен ниже на 10 °C, чем самая высокотемпературная нонвариантная точка Q6 (1850°C), но выше точки P3 (1830 °C) (рис. 1а), поэтому следы от пересечения фазовых областей Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с расплавом не отображаются. В работе [24] рассматривается фрагмент разреза, примыкающий к углу Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, на котором отображены линии раз-

реза, разграничивающие фазовые области L+R5, L+R6, L+R5+R6, R5, C+R5, R5+R6, C+R5+R6 (рис. 2б). Модельный разрез рассчитан в полном объеме, фрагмент, примыкающий к Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, выделен отдельно (рис. 2а). Поскольку при построении модели было принято, что бинарное соединение R5 имеет постоянный состав, то фазовые области, соответствующие R5 и C+R5, совпадают с гранью призмы, тогда как для шпинели R6, наоборот, учитывалось наличие ограниченной растворимости. Тем не менее, топология разреза соответствует сечению, представленному в [24] (рис. 2б).

#### 4. Выводы

Построена трехмерная компьютерная модель Т-х-у диаграммы CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Показано, что ее высокотемпературная часть (выше 1300 °C) в наиболее сложном варианте, то есть при образовании шести бинарных 3CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CaO·6Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – инконгруэнтного и 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CaO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CaO·2Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – конгруэнтного плавления и трех тройных соединений 3CaO·MgO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CaO·2MgO·8Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 2CaO·2MgO·14Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, состоит из 234 поверхностей и 85 фазовых областей. Для оценки качества модели проведено сравнение ее разрезов с построенными по экспериментальным данным.



**Рис. 2.** Изотермический разрез 1840 °C: 3D модели (а), экспериментально изученный фрагмент вблизи Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [24] (б) (в [24] соединение CaO·6Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R5) имеет область ограниченной растворимости, а соединение MgO·Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (R6) – постоянного состава, в 3D модели – наоборот)

**Заявленный вклад авторов**

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

**Конфликт интересов**

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

**Список литературы**

1. Surkov N. V., Gartvich Y. G. Modeling of deep-seated high-alumina parageneses on the basis of the stability fields of corundum- and spinel-formative assemblages of the system CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub>. *Russian Geology and Geophysics*. 2012;53(1): 51–61. <https://doi.org/10.1016/j.rgg.2011.12.004>
2. Банушкина С. В., Гартвич Ю. Г., Голицына З. Ф., Сурков Н. В. Экспериментальное исследование моновариантных реакций плавления в форстеритнормативной части системы CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub> в связи с образованием шпинелевых перидотитов. *Международный научно-исследовательский журнал*. 2017;66(12): 153–161. <https://doi.org/10.23670/IRJ.2017.66.050>
3. Шабанова Г. Н., Корогодская А. Н. Физико-химические основы создания шпинельсодержащих цементов. Ч. 1. Субсолидусное строение алюминатных оксидных систем. *Огнеупоры и техническая керамика*. 2014;6: 3–7. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=23998838>
4. Lutsyk V. I., Vorob'eva V. P. Computer models of eutectic-type T-x-y diagrams with allotropy. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. 2010;101(1): 25–31. <https://doi.org/10.1007/s10973-010-0855-0>
5. Vorob'eva V. P., Zelenaya A. E., Lutsyk V. I., Sineva S. I., Starykh R. V., Novozhilova O. S. High-temperature area of the Fe-Ni-Co-Cu diagram: experimental study and computer design. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. 2021;42(2): 175–193. <https://doi.org/10.1007/s11669-021-00863-3>
6. Lutsyk V. I., Zelenaya A. E., Zyryanov A. M. Multicomponent systems simulation by the software of "Diagrams Designer". *Journal Materials, Methods & Technologies. International Scientific Publications*. 2008;2(1): 176–184. Режим доступа: <https://www.scientific-publications.net/download/materials-methods-and-technologies-2008.pdf>
7. Levin E. M., Robbins C. R., McMurdie H. F. *Phase Diagrams for Ceramists*. Ohio: American Ceramic Society; 1964. 600 p.
8. Бережной А. С. Многокомпонентные системы окислов. Киев: Наукова думка; 1970. 542 с.
9. Торопов Н. А., Барзаковский В. П., Лапшин В. В., Курцева Н. Н. *Диаграммы состояния силикатных систем*. Справочник. Вып. первый. Двойные системы. Ленинград: Наука, Ленинградское отделение; 1969. 822 с.
10. Jung I. -H., Decterov S. A., Pelton A. D. Critical thermodynamic evaluation and optimization of the MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, and MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub> systems. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. 2004;25(4): 329–345. <https://doi.org/10.1007/s11669-004-0151-4>
11. Zienert T., Fabrichnaya O. Thermodynamic assessment and experiments in the system MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. *CALPHAD*. 2013;40: 1–9. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2012.10.001>
12. Lea F. M., Desh C. H. *The chemistry of cement and concrete*. 2d ed., London: Edward Arnold & Co; 1956.
13. Nurse R. W., Welch J. H., Majumdar A. J. The CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system in a moisture-free atmosphere. *Transactions of the British Ceramic Society*. 1965;64: 409–418.
14. Berman R. G., Brown T. H. A Thermodynamic model for multicomponent melts, with application to the system CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub>. *Geochimica et Cosmochimica Acta*. 1984;48(4): 661–678. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(84\)90094-2](https://doi.org/10.1016/0016-7037(84)90094-2)
15. Mao H., Selleby M., Sundman B. A re-evaluation of the liquid phases in the CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> systems. *CALPHAD*. 2004;28(3): 307–312; <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2004.09.001>
16. Jerebtsov D. A., Mikhailov G. G. Phase diagram of CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system. *Ceramics International*. 2001;27(1): 25–28. [https://doi.org/10.1016/S0272-8842\(00\)00037-7](https://doi.org/10.1016/S0272-8842(00)00037-7)
17. Smirnov G. S., Chatterjee A. K., Zhmoidin G. I. The phase equilibrium diagram of the ternary subsystem CaO-CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-11CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>·CaF<sub>2</sub>. *Journal of Materials Science*. 1973;8(9): 1278–1282. <https://doi.org/10.1007/BF00549342>
18. Taylor H. F. W. *Cement chemistry*. London: Thomas Telford; 1997. 459 p.
19. Lea F. *Lea's chemistry of cement and concrete*. London: Elsevier Ltd; 1998. 1057 p.
20. De Noirfontaine M. -N., Tusseau-Nenez S., Girod-Labianca C., Pontikis V. CALPHAD formalism for portland clinker: Thermodynamic models and databases. *Journal of Materials Science*. 2012;47(3): 1471–1479. <https://doi.org/10.1007/s10853-011-5932-7>
21. Hentschel G. Mayenit 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> und brownmillerit, 2CaO·(Al,Fe)·2O<sub>3</sub>, zwei neue minerale in den kalksteineinschlüssen der lava des ettringer bellerberges. *Neues Jahrbuch für Mineralogie, Monatshefte*. 1964: 22–29.
22. Tolkacheva A. S., Shkerin S. N., Plaksin S. V., et al. Synthesis of dense ceramics of single-phase mayenite (Ca<sub>12</sub>Al<sub>14</sub>O<sub>32</sub>)O. *Russian Journal of Applied Chem-*

istry. 2011;84(6): 907–911. <https://doi.org/10.1134/S1070427211060012>

23. Rankin G. A., Merwin H. E. The ternary system CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgO. *Journal of the American Chemical Society*. 1916;38(3): 568–88; <https://doi.org/10.1021/ja02260a006>

24. De Aza A. H., Iglesias J. E., Pena P., De Aza S. Ternary system Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgO-CaO: Part II, Phase relationships in the subsystem Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-CaAl<sub>4</sub>O<sub>7</sub>. *Journal of the American Chemical Society*. 2000;83(4): 919–27. <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.2000.tb01295.x>

### Информация об авторах

*Воробьева Вера Павловна*, д. ф.-м. н., в. н. с. сектора компьютерного конструирования материалов, Институт физического материаловедения СО РАН, Улан-Удэ, Российская Федерация, e-mail: vvorobjeva@mail.ru. ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-2714-3808>.

*Зеленая Анна Эдуардовна*, к. ф.-м. н., с. н. с. сектора компьютерного конструирования материалов, Институт физического материаловедения СО РАН, Улан-Удэ, Российская Федерация, e-mail: zel\_ann@mail.ru. ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-5232-8567>.

*Луцык Василий Иванович*, д. х. н., заведующий сектором компьютерного конструирования материалов, Институт физического материаловедения СО РАН, Улан-Удэ, Российская Федерация, e-mail: vluts@ipms.bsnet.ru. ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-6175-0329>.

*Ламуева Марина Владимировна*, аспирант сектора компьютерного конструирования материалов, Институт физического материаловедения СО РАН, Улан-Удэ, Российская Федерация, e-mail: marina\_bgu@mail.ru. ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0001-8347-1753>.

*Поступила в редакцию 31.05.2021; одобрена после рецензирования 23.06.2021; принята к публикации 15.07.2021; опубликована онлайн 25.09.2021.*