

Термодинамический анализ хлорирования оксида алюминия

Т. Н. Ветчинкина

Выполнен термодинамический анализ хлорирования оксида алюминия для основных возможных реакций взаимодействия с хлором. Протекание процесса возможно только в направлении снижения энергии Гиббса (ΔG). Условие $\Delta G < 0$ определяет принципиальную возможность проведения процесса в заданных условиях и определяется только начальным и конечным состоянием системы. Рассчитанные значения энергии Гиббса и константы равновесия в диапазоне температур 400 – 1000 К показывают, что в присутствии восстановителя равновесие реакций смещено в сторону образования хлорида алюминия. Установлено, что изменения энергии Гиббса реакций хлорирования полиморфных модификаций Al_2O_3 возрастает в ряду: $\gamma-Al_2O_3$, Al_2O_3 аморфный, $\delta-Al_2O_3$, $\alpha-Al_2O_3$. Эффективно оценить основные закономерности получения безводного хлорида алюминия в реагирующей системе возможно при оценке изменения соотношения исходных компонентов. Выполнен термодинамический анализ систем $Al - O - C - Cl$ и $Al - O - C - Cl - Si - Na$ при различном соотношении компонентов. Последняя система представляет черновой глинозем, содержащий алюмосиликат натрия. Показано, что 100 % выход целевых продуктов при полном использовании хлора соответствует стехиометрии их химического взаимодействия. Определена возможность селективного хлорирования Al_2O_3 и $SiCl_4$. Оксид натрия, как показали расчеты, полностью превращается в хлорид, что позволяет использовать остаток от хлорирования для получения алюмокремниевых сплавов без примесей натрия.

Ключевые слова: оксид алюминия, термодинамика, энергия Гиббса, логарифм константы равновесия, температура, анализ систем, различное соотношение компонентов.

DOI: 10.30791/1028-978X-2023-12-5-11

Введение

Промышленный способ производства алюминия традиционным способом — электролизом криолитоглиноземных расплавов, несмотря на длительное его применение, имеет ряд существенных недостатков, связанных с высокими расходами электроэнергии, дефицитных фторсолей и угольных электродов, а также с загрязнением окружающей среды выделяющимися фторсодержащими газами. Перспективным направлением, решающим эти проблемы, является хлорный способ получения алюминия, реализация которого на основе изменения технологии и аппаратуры позволит использовать низкокачественное алюминийсодержащее сырье, снизить примерно на 30 % расход электроэнергии и высококачественных углеродсодержащих

электродных материалов. При электролизе хлорида алюминия используются графитовые нерасходуемые электроды [1]. Создание крупномасштабной регенерации хлора и практически изолированной технологии обеспечит применение менее дефицитных и агрессивных хлоридов вместо фторидов и позволит создать условия более благоприятные для охраны окружающей среды.

Под руководством д.т.н. Ю.А. Лайнера в ИМЕТ РАН проводились научно-исследовательские работы по хлорированию низкокачественного алюминийсодержащего сырья и разработке материалов, используемых для изготовления нерасходуемых инертных анодов в производстве алюминия [2, 3].

При переработке нефелиновой руды Кольского месторождения получают апатитовый концентрат, который является сырьем для производства фос-

форных удобрений. В качестве хвостов получают нефелиновый концентрат следующего состава, масс. %: Al_2O_3 — 29,0; SiO_2 — 43,2; Fe_2O_3 — 3,0; FeO — 0,8; TiO_2 — 0,37; CaO — 1,7; P_2O_5 — 0,65; MgO — 0,8; Na_2O — 12,0; K_2O — 7,12; потери при прокаливании — 1,26. Способ производства нефелинового концентрата по щелочной технологии методом спекания с известняком позволяет получать глинозем, содопродукты и цемент. При переработке этим способом в раствор переходит кремнезем. Для очистки от SiO_2 требуются дополнительные переделы: двухступенчатое обескремнивание, стадии карбонизации и кальцинации при 1100 – 1200 °С с целью получения $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. При производстве алюминия по хлорной технологии используется черновой глинозем, полученный после термического разложения гидроксида алюминия, который может содержать 2,0 – 2,5 масс. % алюмосиликата натрия. Дополнительную стадию очистки в этом случае проводить не требуется [4].

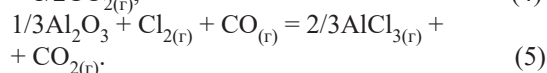
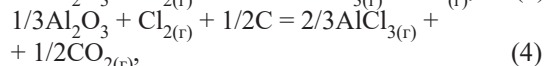
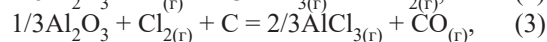
Разработка и совершенствование любой химической технологии базируется на системном подходе к решению проблемы. Наибольшие возможности моделирования сложных химических процессов в широком температурном интервале представляет термодинамический анализ реагирующей системы.

Цель работы — определение принципиальной возможности взаимодействия оксида алюминия с хлором на основании термодинамических характеристик и проведение анализа равновесного состава систем $\text{Al} - \text{O} - \text{C} - \text{Cl}$ и $\text{Al} - \text{O} - \text{C} - \text{Cl} - \text{Si} - \text{Na}$ для определения оптимального соотношения исходных веществ при хлорировании.

Определение термодинамических характеристик хлорирования оксида алюминия

Изучение основных закономерностей процесса хлорирования оксида алюминия в присутствии восстановителя (углерода) и без него требует рассмотрения термодинамических аспектов этих реакций. С практической точки зрения важно знать направление и полноту протекания реакции, а также соотношения равновесных концентраций продуктов реакции и исходных веществ. Для определения этих характеристик были рассчитаны значения энергии Гиббса и константы равновесия в заданном температурном интервале — 400 – 2000 К.

Термодинамический потенциал или энергия Гиббса — это величина, позволяющая установить принципиальную возможность протекания химической реакции в заданных условиях. Расчеты выполнены с помощью программного обеспечения “HSC Chemistry 6.0” [5] для основных возможных реакций взаимодействия оксида алюминия с хлором:



Зависимость изменения энергии Гиббса от температуры протекания реакций (1) – (5) приве-

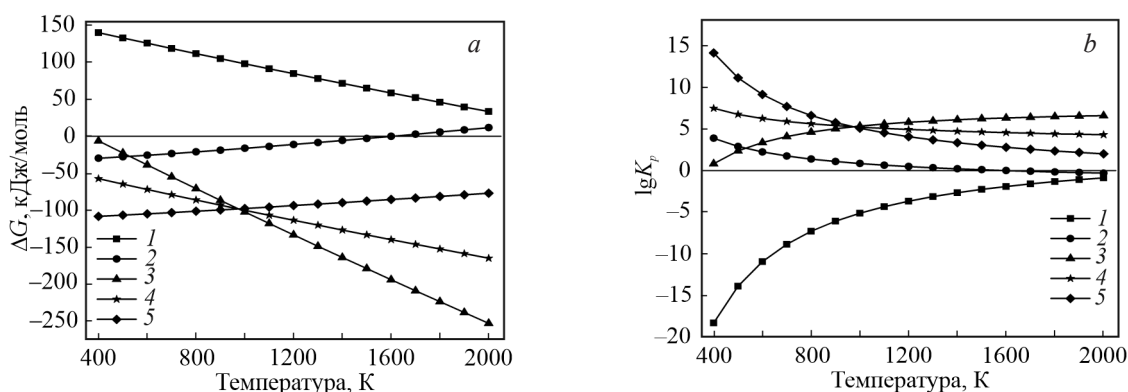


Рис. 1. Температурные зависимости: *a* — изменения энергии Гиббса (ΔG), *b* — изменения логарифма констант равновесия ($\lg K_p$), реакций (1) – (5).

Fig. 1. Temperature dependences of: *a* — the Gibbs energy change (ΔG), *b* — the logarithm change of equilibrium constants ($\lg K_p$), of reactions (1) – (5).

дена на рис. 1а. Термодинамический анализ реакций (3) – (5) показал, что взаимодействие оксида алюминия с хлором в присутствии углерода смещено в сторону образования продуктов реакции. Вероятность образования $AlCl_3$ при взаимодействии с Cl_2 и Cl^{-1} без восстановителя (реакции (1), (2)) исключительно мала, что отражается в изменении величин констант равновесия (рис. 1b). Хлорирование оксида алюминия в присутствии твердого восстановителя (реакция (4)) протекает с образованием CO_2 . Этот процесс экзотермический и с ростом температуры выход продуктов реакции снижается, что подтверждается уменьшением величины константы равновесия (рис. 1b). Реакция (3) — эндотермическая и с ростом температуры выход продуктов увеличивается, а также растет величина константы равновесия (рис. 1b).

Константа равновесия — величина, позволяющая количественно выразить химическое равновесие и условия, определяющие выход продуктов реакции [6]. Величины lgK_p реакций (2), (4), (5)

положительные, с ростом температуры снижаются их значения. Химический процесс этих реакций протекает в прямом направлении (рис. 1b). Реакция (1) (взаимодействие оксида алюминия с атомарным хлором без восстановителя) может протекать исключительно только при высоких температурах, ближе к 2000 К. В случае реакции (3) (взаимодействие Al_2O_3 с Cl_2 в присутствии восстановителя) с ростом температуры lgK_p растет и, следовательно, химический процесс протекает полнее слева направо.

Для реакций (3) и (4) термодинамическое моделирование выполнено для оксида алюминия следующих полиморфных модификаций: $\alpha-Al_2O_3$, $\delta-Al_2O_3$, $\gamma-Al_2O_3$ и Al_2O_3 аморфный. Снижение величины энергии Гиббса с ростом температуры реакции (3) более резкое по сравнению с реакцией (4) (рис. 2а, 2b). Величины lgK_p (рис. 2с, 2d) позволяют количественно оценить выход продуктов реакций. Реакция (3) — эндотермическая, с ростом температуры выход продуктов возрастает, как ука-

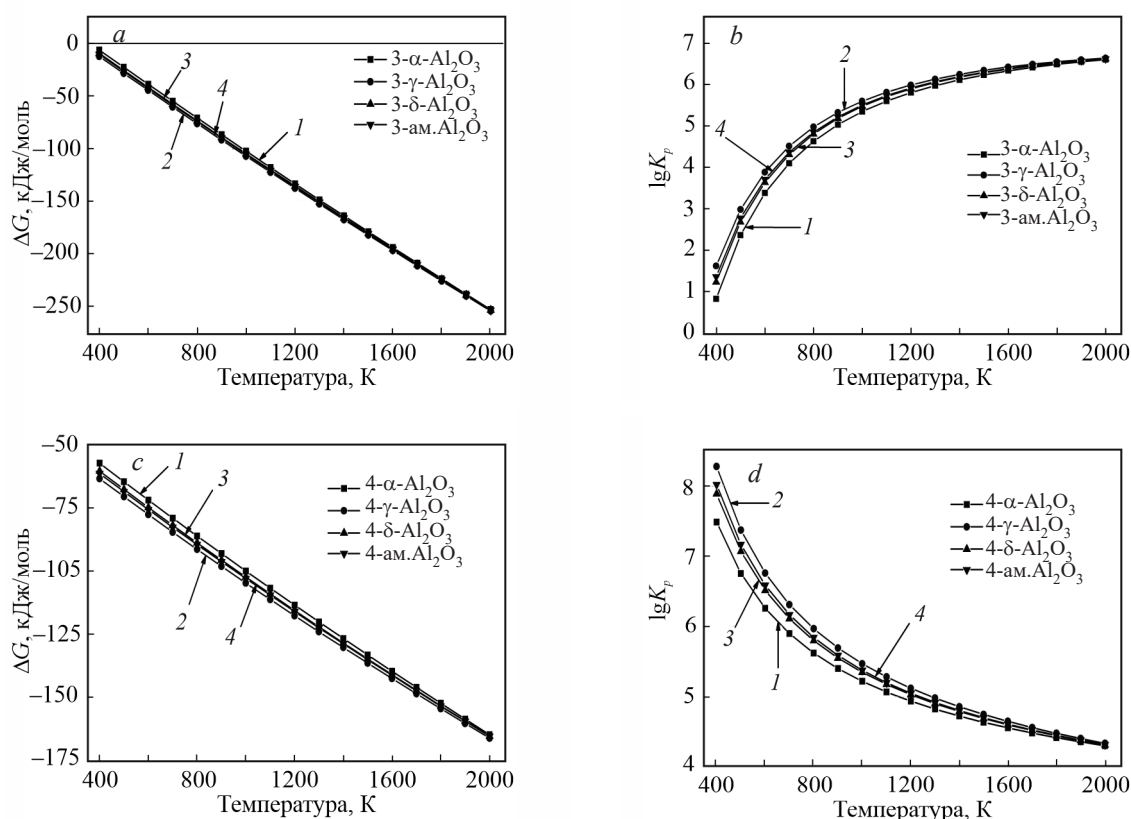


Рис. 2. Температурные зависимости: *a, b* — изменения энергии Гиббса (ΔG), *c, d* — изменения логарифма констант равновесия (lgK_p), реакций с различными модификациями Al_2O_3 .

Fig. 2. Temperature dependences of: *a, b* — the Gibbs energy change (ΔG), *c, d* — the logarithm change of equilibrium constants (lgK_p), of reactions with various modifications of Al_2O_3 .

зывалось выше, по сравнению с экзотермической реакцией (4), у которой с ростом температуры выход продуктов снижается. Значения энергии Гиббса реакций хлорирования полиморфных модификаций Al_2O_3 возрастают в ряду: $\gamma-Al_2O_3$, Al_2O_3 аморфный, $\delta-Al_2O_3$, $\alpha-Al_2O_3$.

Термодинамический анализ систем $Al - O - C - Cl$ и $Al - O - C - Cl - Si - Na$

Анализ расчетных данных на основе равновесной термодинамической модели процесса хлорирования оксида алюминия представляет теоретический и практический интерес, а также позволяет эффективно оценить основные закономерности получения безводного хлорида алюминия в реагирующей системе при изменении соотношения исходных компонентов.

Принцип детального равновесия позволяет представить исследуемый процесс в целом, как совокупность равновесных точечных стадий, которые представлены в виде равенства вероятностей перехода, отнесённого к конечному состоянию системы [7]. Равновесный состав компонентов определяли методом минимизации свободной энергии Гиббса для изобарно-изотермических условий в интервале температур 400 – 2000 К и при общем давлении $P = 1$ атм. с использованием более современного программного комплекса ТЕРРА для моделирования химических равновесий в многокомпонентных системах и с соответствующей базой данных по термодинамическим свойствам компонентов [8].

Для определения равновесного состава веществ при хлорировании проведен термодинами-

ческий анализ систем $Al - O - C - Cl$ и $Al - O - C - Cl - Si - Na$. Система $Al - O - C - Cl$ соответствует процессу хлорирования чистого оксида алюминия, а система $Al - O - C - Cl - Si - Na$ — процессу хлорирования оксида алюминия с примесями алюмосиликата натрия.

Термодинамические расчеты выполнены при различных соотношениях исходных реагентов с учетом образования соединений, концентрация которых превышает $1 \cdot 10^{-2}$ моль/кг. Для системы $Al - O - C - Cl$ газовая фаза состоит из: Cl_2 , Cl_2CO , CO , CO_2 , $AlCl_2$, $AlCl_3$, Al_2Cl_6 , а конденсированная фаза представлена соединениями: Al_2O_3 , C , $AlCl_{3(c)}$. Для системы $Al - O - C - Cl - Si - Na$, газовая фаза состоит из: Cl_2 , CCl_4 , CO , CO_2 , $AlCl_3$, Al_2Cl_6 , $SiCl_4$, $NaCl$, Na_2Cl_2 , а конденсированная фаза: $AlCl_{3(c)}$, $NaCl_{(c)}$.

При исследовании системы $Al - O - C - Cl$ рассмотрено два варианта соотношения компонентов: 1,25:1,1:1:5 (рис. 3а) и 3:2,7:1:12 (рис. 3б). В первом случае в системе имеется избыток C и Cl_2 на 5 %, во втором — недостаток 5 % C . Такие соотношения компонентов выбраны в связи с тем, что при хлорировании оксида алюминия необходимо знать, к образованию каких веществ может привести отклонение от расчетных стехиометрических значений концентраций исходных веществ.

При избытке C и Cl_2 (рис. 3б), в конденсированной фазе отсутствует Al_2O_3 во всем интервале температур, то есть выход целевого продукта $AlCl_3$ составляет 100 %. При температурах выше 600 К в конденсированной фазе находится избыточное количество углерода. При избытке Cl_2 в газовой фазе равновесного состава присутствует хлор в мо-

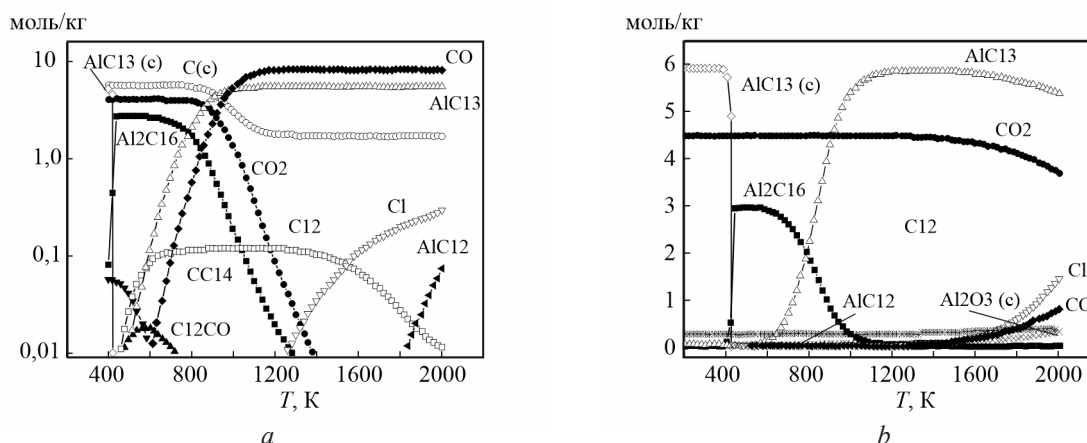


Рис. 3. Равновесный состав системы $Al - O - C - Cl$ при соотношении компонентов: а — 1,25:1,1:1:5 (избыток C и Cl_2), б — 3:2,7:1:12 (недостаток C).

Fig. 3. The equilibrium composition of the $Al - O - C - Cl$ system at a ratio of components: а — 1.25:1.1:1:5 (excess C and Cl_2), б — 3:2.7:1:12 (disadvantage C).

лекулярном и атомарном состояниях. При избытке С и Cl_2 возможно образование CCl_4 и Cl_2CO , которые диссоциируют при температурах выше 600 К. Увеличение концентрации Cl_2 до температуры 700 К вызвано термической диссоциацией образовавшихся при низких температурах CCl_4 , Cl_2CO . При температурах выше 1200 К в газовой фазе преобладает атомарный хлор.

Практический интерес представляет соотношение CO и CO_2 в газовой фазе. В рассматриваемом варианте системы (рис. 3а) при температурах до 1000 К преобладает CO_2 в газовой фазе, а выше 1000 К — CO . Уменьшение концентрации углерода в конденсированной фазе при температурах выше 900 К связано с соотношением CO_2 и CO . Содержание диоксида углерода снижается, а оксида углерода увеличивается.

Образование низших хлоридов алюминия (AlCl_2) в результате термического разложения AlCl_3 наблюдается при температурах выше 1700 К.

Недостаток углерода при взаимодействии оксида алюминия с хлором приводит к равновесному составу, который представлен на рис. 3б.

Термодинамические расчеты системы данного состава показали, что Al_2O_3 в конденсированной фазе присутствует во всем интервале температур. От 400 до 800 К хлорид алюминия в основном существует в виде димера Al_2Cl_6 , а в интервале 800 – 2000 К вследствие диссоциации димер сосуществует с мономером. Выше 800 К стабильной формой является мономер. При хлорировании оксида алюминия с недостатком углерода в равновесной системе наблюдается преимущественное образование CO_2 . С ростом температуры выход продуктов реакции (AlCl_3 и CO_2) снижается, так как эта реакция является экзотермической. В рассматриваемом варианте равновесного состава отсутствуют соединения CCl_4 и Cl_2CO .

Технология получения алюминия электролизом AlCl_3 предъявляет высокие требования к чистоте хлоридов. Одной из наиболее вредных и трудноудаляемых примесей является кислород. С этих позиций представляют интерес данные о возможном образовании оксихлоридов алюминия. В равновесных составах (рис. 3а и 3б) оксихлориды отсутствуют, то есть их концентрации ничтожно малы. Таким образом, для полного превращения Al_2O_3 в AlCl_3 углерода должно быть не меньше, чем требуется по стехиометрии реакции между оксидом алюминия и хлором.

Практический интерес представляют данные термодинамического расчета равновесного состава системы $\text{Al} - \text{O} - \text{C} - \text{Cl} - \text{Si} - \text{Na}$, представ-

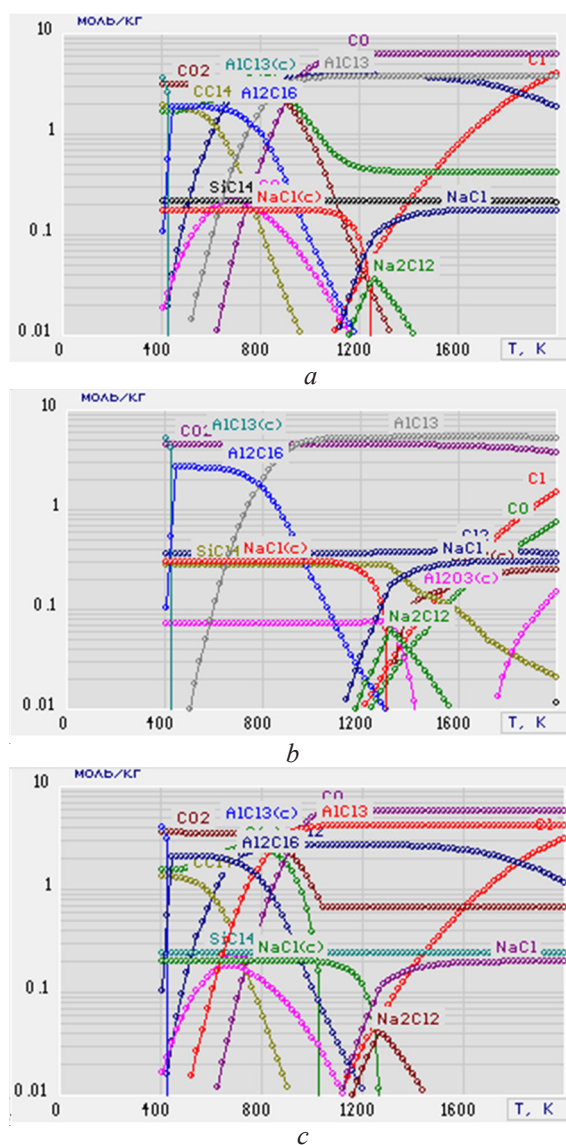


Рис. 4. Равновесный состав системы $\text{Al} - \text{O} - \text{C} - \text{Cl} - \text{Si} - \text{Na}$ при соотношении компонентов: а — 25:25:20:175:1,5:1 (5 % избытка С и Cl_2), б — 21:21:7,7:91,4:1,1:1 (5 % недостатка С), с — 25:25:17:150:1,5:1 (стехиометрия).

Fig. 4. The equilibrium composition of the $\text{Al} - \text{O} - \text{C} - \text{Cl} - \text{Si} - \text{Na}$ system with a component ratio: а — 25:25:20:175:1,5:1 (5 % excess of C and Cl_2), б — 21:21:7,7:91,4:1,1:1 (5 % disadvantage C), с — 25:25:17:150:1,5:1 (stoichiometry).

ляющей черновой глинозем, полученный после термического разложения гидроксида алюминия, содержащего алюмосиликат натрия. В первом случае (рис. 4а) исходные компоненты рассчитаны в соотношении 25:25:20:175:1,5:1 с избытком 5 % С и Cl_2 . Во втором случае (рис. 4б) — при соотно-

шении 21:21:7,7:91,4:1,1:1 с недостатком 5 % С. В равновесном составе (рис. 4а) NaCl находится в конденсированной фазе лишь до температуры 1300 К. Следовательно, при хлорировании оксида алюминия с примесью NaO₂ возможно осуществление процесса без накопления в реакционной зоне хлоридов натрия.

Изучение равновесного состава системы Al – O – C – Cl – Si – Na при недостатке углерода (5 %) важно с позиций селективности хлорирования основных компонентов. Из равновесного состава, проведенного на рис. 4б, видно, что до температуры 1400 К в конденсированной фазе находится незначительное количество Al₂O₃ < 0,01 моль/кг, а выше 1800 К содержание его возрастает. Это объясняется вторичным взаимодействием между Al₂O₃ и SiCl₄. На этом основана возможность селективного хлорирования.

В отличие от оксидов алюминия и кремния, оксид натрия, как показали расчеты, полностью превращается в хлорид, что позволяет использовать остаток от хлорирования для получения алюмокремниевых сплавов без примесей натрия. При недостатке углерода в равновесном составе системы Al – O – C – Cl – Si – Na в газовой фазе во всем интервале температур преобладает CO₂, выше 1200 К — CO и атомарный хлор.

Равновесный состав системы при стехиометрическом соотношении компонентов приведен на рис. 4с. При этом составе отсутствуют в конденсированной фазе исходные компоненты, а в газовой фазе нет свободного хлора, то есть выход хлоридов составляет 100 % во всем интервале температур при полном использовании хлора. При стехиометрическом соотношении компонентов (рис. 4с), в газовой фазе до 1000 К преобладает CO₂, выше — CO. Следует отметить, что во всех ранее рассмотренных вариантах отсутствуют оксихлориды. Это имеет важное практическое значение, так как технология получения алюминия электролизом хлорида алюминия предъявляет высокие требования к чистоте хлоридов — содержание кислорода допускается только в пределах 0,02 – 0,04 масс. %.

Результаты термодинамических расчетов равновесного состава систем Al – O – C – Cl и Al – O – C – Cl – Si – Na при различных соотношениях компонентов показали, что наиболее целесообразно с точки зрения выхода целевого продукта и полного использования хлора вести процесс реакции хлорирования при стехиометрическом соотношении участвующих в химическом взаимодействии веществ.

Выводы

Определены термодинамические характеристики реакций хлорирования оксида алюминия.

Показано, что в присутствии восстановителя равновесие реакций смещено в сторону образования хлорида алюминия. При температурах выше 1000 К с термодинамических позиций эффективнее использование углерода, при температурах менее 1000 К — целесообразнее применять оксид углерода.

Проведенный термодинамический анализ систем Al – O – C – Cl и Al – O – C – Cl – Si – Na показал, что оптимальное соотношение исходных веществ при хлорировании оксида алюминия соответствует стехиометрии их химического взаимодействия. В этом случае выход целевых продуктов составляет 100 % при полном использовании хлора.

Установлено, что при хлорировании оксида алюминия с примесями алюмосиликата натрия — Na (AlSi₃O₈), оксид натрия полностью переходит в хлорид натрия. Показана возможность селективного хлорирования Al₂O₃ и SiO₂.

Работа выполнена по государственному заданию № 075-01176-23-00.

Литература/References

1. Борисоглебский Ю.В., Галевский Г.В., Кулагин Н.М., Минцис М.Я., Сиразутдинов Г.А. *Металлургия алюминия*. Новосибирск, Наука, Сибирская издательская фирма РАН, 1999, 438 с.
- Borisoglebsky Yu.V., Galevsky G.V., Kulagin N.M., Mintsis M.Ya., Sirazutdinov G.A. *Metallurgiya alyuminiya [Metallurgy of aluminum]*. Novosibirsk, Nauka Publ., Siberian Publishing Company of the Russian Academy of Sciences, 1999, 438 p. (In Russ.).
2. Лайнер Ю.А., Ветчинкина Т.Н., Симановский Б.А. Особенности хлорирования алюминийсодержащего сырья в кипящем слое. *Химическая технология*, 2006, № 8, с. 17 – 23.
- Liner Yu.A., Vetchinkina T.N., Simanovsky B.A. *Osobennosti hlorigovaniya alyuminijsoderzhashchego syr'ya v kipyashchem cloe [Features of chlorination of aluminum-containing raw materials in a fluidized bed]*. Himicheskaya tekhnologiya [Chemical Technology], 2006, no. 8, pp. 17 – 23. (In Russ.).
3. Лякишев Н.П., Алымов М.И., Калита В.И., Лайнер Ю.А., Самойлов Е.Н., Ветчинкина Т.Н., Рожков Д.О. Синтез и испытание инертных анодов при электролизе криолито-глиноземных расплавов. *Химическая технология*, 2006, № 5, с. 19 – 24.
- Lyakishev N.P., Alymov M.I., Kalita V.I., Liner Yu.A., Samoilov E.N., Vetchinkina T.N., Rozhkov D.O. *Sintez*

- i ispytanie inertnyh anodov pri elektrolize kriolitoglinozemnyh rasplavov [Synthesis and testing of inert anodes during electrolysis of cryolite-alumina melts]. Himicheskaya tekhnologiya [Chemical Technology], 2006, no. 5, pp. 19 – 24 (In Russ.).
4. Ветчинкина Т.Н. Физико-химические основы процесса хлорирования оксида алюминия, полученного из его гидратных форм. Металлы, 2022, № 6, с. 3 – 8.
 - Vetchinkina T. N. Physicochemical foundations of the chlorination of alumina prepared from the hydrate forms of aluminum. Russian Metallurgy (Metally), 2022, no. 11, pp. 1339 – 1345.
 5. Roine A. Chemical reaction and equilibrium software with extensive thermochemical database. Pori: Outokumpu Research OY, 2002, 448 p.
 6. Зимон А.Д. Физическая химия. Москва, Издательство Агар, 2006, 320 с.
 - Zimon A.D. Fizicheskaya khimiya [Physical chemistry]. Moscow, Agar Publ., 2006. 320 p. (In Russ.).
 7. Бондарев Б.В., Калашников Н.П., Спирин Г.Г. Курс общей физики. Книга 3: Термодинамика.
 - Статистическая физика. Строение вещества. Москва, Издательство Юрайт, 2016, 369 с.
 - Bondarev B.V., Kalashnikov N.P., Spirin G.G. Kurs obshchej fiziki. Kniga 3: Termodinamika. Statisticheskaya fizika. Stroenie veshchestva [General physics course. Book 3: Thermodynamics. Statistical physics. The structure of matter]. Moscow, Yurayt Publishing House, 2016, 369 p. (In Russ.).
 8. Трусов Б.Г. Программная система моделирования фазовых и химических равновесий при высоких температурах. Вестник МГТУ им. им. Н.Э. Баумана, сер. Приборостроение, 2012, спецвыпуск 2, с. 240 – 249.
 - Trusov B.G. Programmnyaya sistema modelirovaniya fazovyh i himicheskikh ravnovesij pri vysokih temperaturah [Software system for modeling phase and chemical equilibria at high temperatures]. Vestnik MG TU im. im. N.E. Bauman, ser. Priborostroenie [Bulletin of the Bauman Moscow State Technical University, ser. Instrumentation], 2012, Special issue 2, pp. 240 – 249.

Статья поступила в редакцию — 15.03.2023 г.
 после доработки — 01.06.2023 г.
 принята к публикации — 02.06.2023 г.

Ветчинкина Татьяна Николаевна — Институт Металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН (119334, Москва, Ленинский проспект, 49), кандидат технических наук, ведущий научный сотрудник, специалист в области физикохимии и технологии алюминия. E-mail: tvetchinkina@yandex.ru.

Thermodynamic analysis of chlorination aluminum oxide

T. N. Vetchinkina

Thermodynamic analysis of aluminum oxide chlorination is of theoretical and practical interest and is performed for the main possible reactions of interaction with chlorine. The process is possible only in the direction of decreasing (decreasing) the Gibbs energy (ΔG). The condition ΔG_0 determines the principal possibility of carrying out the process under specified conditions and is determined only by the initial and final state of the system. The calculated values of the Gibbs energy and the equilibrium constant in the temperature range 400 – 1000 K show that in the presence of a reducing agent, the equilibrium of reactions is shifted towards the formation of aluminum chloride. It was found that the changes in the Gibbs energy of chlorination reactions of polymorphic modifications of Al_2O_3 increases in the series: $\gamma-Al_2O_3$, Al_2O_3 am., $\delta-Al_2O_3$, $\alpha-Al_2O_3$. It is possible to effectively assess the basic laws of obtaining anhydrous aluminum chloride in the reacting system by evaluating the change in the ratio of the initial components. Thermodynamic analysis of Al – O – C – Cl and Al – O – C – Cl – Si – Na systems with different component ratios was performed. The latter system is a rough alumina containing sodium aluminosilicate. It is shown that the 100 % yield of the target products with the full use of chlorine corresponds to the stoichiometry of their chemical interaction. The possibility of selective chlorination of Al_2O_3 and SiC_{14} has been determined. As calculations have shown, sodium oxide is completely converted into chloride, which makes it possible to use the residue from chlorination to obtain aluminum-silicon alloys without sodium impurities.

Keywords: aluminum oxide, thermodynamics, Gibbs energy, temperature, systems analysis, various component ratios.

Vetchinkina Tatiana — Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of the Russian Academy of Sciences (Moscow, 119334, Leninsky Prospekt, 49), PhD (Eng), leading researcher, specialist in the field of physicochemistry and aluminum technology. E-mail: tvetchinkina@yandex.ru.