



Rogério Navarro Correia de Siqueira

**Modelagem termodinâmica de escórias contendo TiO_2 :
modelo quasi-químico modificado de Kapoor-Frohberg-
Gaye**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Metalúrgica e de Materiais pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica do Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia da PUC-Rio.

Orientador: Roberto Ribeiro de Avillez

Rio de Janeiro, 29 agosto de 2005



Rogério Navarro Correia de Siqueira

**Modelagem termodinâmica de escórias contendo TiO_2 :
modelo quasi-químico modificado de Kapoor-Frohberg-
Gaye**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Metalúrgica e de Materiais pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica do Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Roberto Ribeiro de Avillez

Orientador

Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia - PUC-Rio

Prof. Fernando Cosme Rizzo Assunção

Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia - PUC-Rio

Prof. André Luiz Vasconcellos da Costa e Silva

Universidade Federal Fluminense-UFF

Prof. Flavio Beneduce Neto

Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo -IPT

Prof. José Eugenio Leal

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 29 de agosto de 2005

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Rogério Navarro Correia de Siqueira

Graduado em engenharia química pelo departamento de química da PUC-Rio no ano de 2002, teve seu primeiro contato com a termodinâmica no ano de 1999 ao ingressar no programa graduação sanduíche da CAPES, desenvolvendo um trabalho na área de termodinâmica experimental junto ao departamento de termodinâmica e técnicas de resfriamento da universidade de Karlsruhe. Atualmente trabalha junto ao DCMM na área de termodinâmica computacional junto com o professor Roberto Ribeiro de Avillez.

Ficha Catalográfica

Siqueira, Rogério Navarro Correia de

Modelagem termodinâmica de escórias contendo TiO_2 : modelo quasi-químico modificado de Kapoor-Frohberg-Gaye / Rogério Navarro Correia de Siqueira ; orientador: Roberto Ribeiro de Avillez. – Rio de Janeiro : PUC, Departamento de Ciências dos Materiais e Metalurgia, 2005.

271 f. ; 30 cm

Dissertação (mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Ciências dos Materiais e Metalurgia.

Inclui referências bibliográficas.

1. Ciências dos materiais e metalurgia – Teses. 2. Escória. 3. Dióxido de Titânio. 4. Modelo quasi-químico modificado. 5. Termodinâmica computacional. I. Avillez, Roberto Ribeiro de. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Ciências dos Materiais e Metalurgia. III. Título.

CDD: 669

Para meus Pais, minha irmã Patrícia, e minha namorada Gisele.

Agradecimentos

A Deus pela força espiritual e perseverança.

Ao meu orientador Roberto Ribeiro de Avillez por todo o conhecimento trocado, pelas idéias, pelo incentivo e todo o companheirismo.

Aos membros da banca examinadora pela oportunidade concedida.

À PUC-Rio e aos professores do DCMM por todo o conhecimento transmitido.

A todos os funcionários do DCMM.

À CAPES pelo apoio financeiro.

À minha família pelo acolhimento, carinho e compreensão incondicionais.

À namorada Gisele, pelo apoio, carinho e força nos momentos mais difíceis.

A todos que de uma forma ou de outra contribuíram para a conclusão de mais esta etapa da minha vida.

Resumo

Navarro Correia de Siqueira, Rogério. **Modelagem termodinâmica de escórias contendo TiO_2 : modelo quasi-químico modificado de Kapoor-Frohberg-Gaye**. PUC-Rio, 2005. 271p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

O presente trabalho teve como objetivo central, a modelagem termodinâmica computacional de escórias contendo TiO_2 através do modelo termodinâmico quase-químico estatístico de Kapoor-Frohberg-Gaye. Neste contexto, os seguintes pseudo-binários foram investigados: Al_2O_3 - TiO_2 , MgO - TiO_2 , MnO - TiO_2 e FeO - TiO_2 . Os resultados das otimizações demonstraram a possibilidade de emprego do referido modelo para uma descrição quantitativa do comportamento termodinâmico destes sistemas. Tanto os diagramas de fases quanto os dados de atividade química foram avaliados e satisfatoriamente descritos pelo modelo. Adicionalmente, ficou evidente a necessidade de correção dos modelos de energia de Gibbs (G) dos óxidos mistos presentes em cada um dos sistemas. As correções determinaram, para a faixa de temperatura onde os dados termodinâmicos foram otimizados, desvios relativos em G inferiores a 1%, sendo perfeitamente aceitáveis, levando-se em consideração comparações entre valores de energia de Gibbs disponíveis na literatura. Os resultados do presente trabalho foram comparados com os obtidos por Erickson e Pelton (1992). Nesta última referência os autores empregaram o modelo de Pelton e Blander (1986), em essência muito similar ao modelo utilizado no presente trabalho. As comparações evidenciaram que os dois modelos podem fornecer uma descrição quantitativa equivalente para o comportamento termodinâmico experimental.

Palavras-chave

Escória; TiO_2 ; termodinâmica computacional; modelo quase-químico modificado

ABSTRACT

Navarro Correia de Siqueira, Rogério. **Thermodynamic Modeling of TiO₂ containing slags: Kapoor-Frohberg-Gaye modified quasi-chemical model.** PUC-Rio, 2005. 271p. Master Dissertation – Department of Materials Science and Metallurgy, Pontifical Catholic University of Rio de Janeiro.

The present work has the main goal of modeling liquid oxide mixtures (slags) by using the Kapoor-Frohberg-Gaye modified quasi-chemical model. In this context the thermodynamic behavior of the following systems was studied: Al₂O₃-TiO₂, MnO-TiO₂, MgO-TiO₂ and FeO-TiO₂. The optimization results confirmed that the Kapoor-Frohberg-Gaye model can in fact be used for the quantitative description of the thermodynamics of all the investigated systems. Phase diagrams and chemical activity data were assessed and satisfactorily described by the model. It was evident that the Gibbs energy (*G*) of the mixed oxides had to be modified. However, the relative energy corrections for the Gibbs energy was equal or less than 1%, for the temperature range between where the thermodynamic data was optimized, which is quite acceptable, taking into account comparisons of Gibbs energy values from the current literature. Comparisons were done with the results from Erickson e Pelton (1992), which used a modified quasi-chemical model proposed by Pelton e Blander (1986), very similar to the model used in the present work. The comparison shows that the two models can offer an equivalent quantitative description of the experimental thermodynamics.

Key-words

Computational thermodynamics; slag; quasi-chemical model; Titanium oxide

Sumário

1 Introdução.	21
2 Modelagem termodinâmica de escórias.	24
3 Equilíbrio termodinâmico em sistemas poli-fásicos.	39
3.1. Thermocalc e Macros.	56
3.2. Cálculo de equilíbrio via método de Lagrange (Hillert, 1981).	62
3.3. Arquivos de experimentos (“pop-files”).	78
3.4. Cálculo de diagrama de fases (forças motrizes).	90
4 Modelos de energia de Gibbs.	95
4.1. Energia de Gibbs de fases estequiométricas.	95
4.1.1. Entalpia padrão a 298 K.	96
4.1.2. Entropia padrão a 298 K.	100
4.1.3. Energia de Gibbs padrão.	105
4.1.3.1. Energia de Gibbs padrão de um líquido puro e alotropia.	106
4.1.3.2. Estimativa de C_p .	113
4.2. Energia de Gibbs de soluções condensadas.	115
4.2.1. Solução regular e proposta quase-química clássica.	125
4.2.2. Modelos para sistemas com forte ordenamento local.	143
4.2.2.1. Modelo de Yokokawa e Niwa (1969).	148
4.2.2.2. Modelo de Lin e Pelton (1979).	153
4.2.2.3. Modelo de Pelton e Blander (1986).	159
4.2.2.4. Modelo de Kapoor e Froberg (1971).	170
5 Termodinâmica dos pseudobinários investigados.	179
5.1. Al_2O_3 - TiO_2 .	179
5.2. MgO - TiO_2 .	182
5.3. MnO - TiO_2 .	183
5.4. FeO - TiO_2 .	186

6 Modelagem dos sistemas investigados.	189
6.1. Al ₂ O ₃ -TiO ₂ .	192
6.1.1. Óxidos puros, entalpia de fusão e temperatura de fusão.	192
6.1.2. Óxidos mistos.	194
6.2. MgO-TiO ₂ .	194
6.2.1. Óxidos puros, entalpia de fusão e temperatura de fusão.	195
6.2.2. Óxidos mistos.	195
6.3. MnO-TiO ₂ .	196
6.3.1. Óxidos puros, entalpia de fusão e temperatura de fusão.	197
6.3.2. Óxidos mistos.	197
6.4. FeO-TiO ₂ .	198
6.4.1. Óxidos puros, entalpia de fusão e entropia de fusão.	198
6.4.2. Óxidos mistos.	199
7 Resultados obtidos.	201
7.1. Al ₂ O ₃ -TiO ₂ .	201
7.2. MgO-TiO ₂ .	205
7.3. MnO-TiO ₂ .	211
7.4. FeO-TiO ₂ .	220
8 Discussão dos resultados.	227
8.1. Al ₂ O ₃ -TiO ₂ .	230
8.2. MgO-TiO ₂ .	232
8.3. MnO-TiO ₂ .	233
8.4. FeO-TiO ₂ .	235
9 Conclusões.	238
10 Perspectivas futuras.	241
11 Referências bibliográficas.	244
12 Apêndices.	250

12.1. Macros construídas.	250
12.1.1. $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$.	250
12.1.2. MgO-TiO_2 .	252
12.1.3. MnO-TiO_2 .	254
12.1.4. FeO-TiO_2 .	256
12.2. Arquivos de experimentos.	258
12.2.1. $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$.	258
12.2.2. MgO-TiO_2 .	260
12.2.3. MnO-TiO_2 .	261
12.2.4. FeO-TiO_2 .	265
12.3. Dados de atividade química e linha liquidus.	267
12.3.1. Linha liquidus do sistema $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$:	267
12.3.2. Linha liquidus do sistema MnO-TiO_2 .	268
12.3.3. Atividades químicas do sistema MnO-TiO_2 .	269
12.3.4. Linha liquidus do sistema FeO-TiO_2 .	270
12.3.5. Atividades químicas do sistema FeO-TiO_2 .	271

Lista de tabelas

Tabela 1: classificação de sistemas macroscópicos.	40
Tabela 2: Atividades químicas como função da pressão parcial de O_2 (Rao e Gaskell, 1981c).	88
Tabela 3: Parâmetros otimizados dos pseudobinários investigados.	189
Tabela 4: Temperatura e entalpia de fusão do Al_2O_3 .	193
Tabela 5: Temperatura de fusão do Rutilo.	193
Tabela 6: Entalpia de fusão do Rutilo.	194
Tabela 7: Entalpia e temperatura de fusão do MgO .	195
Tabela 8: Entalpia e temperatura de fusão do MnO .	197
Tabela 9: Entalpia e temperatura de fusão do FeO .	199
Tabela 10: Reações invariantes do sistema Al_2O_3 - TiO_2 .	202
Tabela 11: Reações invariantes do sistema Al_2O_3 - TiO_2 (Slag-atlas, 1995).	202
Tabela 12: Reações invariantes calculadas para o sistema Al_2O_3 - TiO_2 .	204
Tabela 13: Parâmetros otimizados para o sistema Al_2O_3 - TiO_2 .	204
Tabela 14: Reações invariantes do sistema MgO - TiO_2 .	206
Tabela 15: Estabilidade dos óxidos mistos Mg_2TiO_4 e $MgTi_2O_5$	206
Tabela 16: Reações invariantes calculadas para o sistema MgO - TiO_2 .	207
Tabela 17: Parâmetros otimizados para o sistema MgO - TiO_2 .	209
Tabela 18: Desvios absolutos em H_{298} para os óxidos mistos do sistema MgO - TiO_2 .	209
Tabela 19: Reações invariantes observadas por Leusmann (1979).	211
Tabela 20: Diferentes propostas para a energia livre do MnO líquido.	213
Tabela 21: Parâmetros otimizados para o sistema MnO - TiO_2 .	214
Tabela 22: Reações invariantes calculadas para o sistema MnO - TiO_2 .	218
Tabela 23: Reações invariantes do Sistema FeO - TiO_2 .	221
Tabela 24: Reações invariantes calculadas para o sistema FeO - TiO_2 .	223
Tabela 25: Parâmetros otimizados para o sistema FeO - TiO_2 .	224

Tabela 26: Comparações entre diferentes propostas para a energia de Gibbs do MnO líquido.	234
Tabela 27: Dados a serem obtidos para os pseudobinários investigados.	241
Tabela 28: Linha liquidus de acordo com Gulamova e Sarkisova (1989a).	267
Tabela 29: Linha liquidus de acordo com Goldberg (1968).	268
Tabela 30: Linha liquidus de acordo com Leusmann (1979).	268
Tabela 31: Linha liquidus de acordo com Rao e Gaskel (1981c).	268
Tabela 32: Linha liquidus de acordo com Otha e Moritha (1999).	268
Tabela 33: Atividades químicas do MnO determinadas a 1773 K por Rao e Gaskel (1981c).	269
Tabela 34: Atividades químicas do MnO determinadas a 1823 K por Rao e Gaskel (1981c).	269
Tabela 35: Atividades químicas do MnO determinadas a 1823 K por Martin e Bell (1974).	270
Tabela 36: Atividades químicas do MnO determinadas a 1873 K por Otha e Moritha (1999).	270
Tabela 37: Linha liquidus determinada por Grau (1979).	270
Tabela 38: Atividades químicas do FeO determinadas a 1748 K por Sommerville e Bell (1982).	271
Tabela 39: Atividades químicas do FeO determinadas a 1643 K por Ban-Ya et al. (1980).	271

Lista de figuras

Figura 1: Modelo simplificado de um forno de refino.	22
Figura 2: Poli-íon de silício.	25
Figura 3: Ânion orto-silicato.	27
Figura 4: Célula M-O-Si.	34
Figura 5: Célula Si-O-Si.	34
Figura 6: Representação geométrica do conceito de força motriz (TCQ-User Guide, 1995-2004).	93
Figura 7: Modelos teóricos de C_p (Göpel e Wiemhöfer, 2000).	101
Figura 8: Energia de Gibbs de uma fase sólida que atende à terceira lei da termodinâmica.	108
Figura 9: Condição de equilíbrio entre formas alotrópicas α e β .	109
Figura 10: Efeito da diferença de C_p sobre a energia de Gibbs do TiO_2 líquido.	111
Figura 11: Efeito da diferença de C_p sobre a energia de Gibbs do MgO líquido.	111
Figura 12: Efeito da diferença de C_p sobre a energia de Gibbs do FeO líquido.	112
Figura 13: Efeito da diferença de C_p sobre a energia de Gibbs do Al_2O_3 líquido.	112
Figura 14: Energia de Gibbs de mistura regular – $Z = 10$, $W_{AB} = 2000$ J/mol.	130
Figura 15: Região spinodal no diagrama de energia de Gibbs de mistura de um binário $A-B$.	131
Figura 16: Inconsistência natural à permutação de pares (Gokcen, 1986).	135
Figura 17: Solução regular vs. quase-química – $T = 700$ K, $Z = 10$, $W_{AB} = 2000$ J/mol.	140
Figura 18: Número de moles de pares AB como função da fração molar de A – $T = 700$ K, $Z = 10$, $W_{AB} = +2000$ J/mol.	142

Figura 19: Número de pares AB como função da fração molar de $A - T = 700 \text{ K}$, $Z = 10$, $W_{AB} = -2000 \text{ J/mol}$.	142
Figura 20: Diagrama de fases para o sistema $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ (presente trabalho).	146
Figura 21: Diagrama de fases do sistema FeO-SiO_2 (Pelton e Blander, 1986).	146
Figura 22: Energia de Gibbs de mistura de Yokokawa e Niwa (Gaskel, 1981).	152
Figura 23: Atividade química do PbO – modelo de Yokokawa e Niwa (Gaskel, 1981)	152
Figura 24: Entalpia de mistura característica do sistema PbO-SiO_2 (Lin e Pelton, 1979).	157
Figura 25: Entalpia de mistura dos sistemas LiF-BeF_2 e KF-BeF_2 (Lin e Pelton, 1979).	158
Figura 26: Aproximação simétrica e assimétrica no triângulo de Gibbs.	169
Figura 27: Diagrama de fases do sistema $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ (Seifert et al., 2001).	179
Figura 28: Diagrama de fases do sistema $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ (Levin et al., 1964).	180
Figura 29: Diagrama de fases do sistema $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ (Slag-atlas, 1995).	181
Figura 30: Diagrama de fases do sistema MgO-TiO_2 (Levin et al., 1964).	182
Figura 31: Diagrama de fases do sistema MgO-TiO_2 (Levin et al., 1964).	183
Figura 32: Diagrama de fases do sistema MnO-TiO_2 (Leusmann, 1979).	184
Figura 33: Diagrama de fases do sistema MnO-TiO_2 (Leusmann, 1979).	184
Figura 34: Diagrama de fases do sistema FeO-TiO_2 (Levin et al., 1964).	186
Figura 35: Diagrama de fases do sistema FeO-TiO_2 (Levin et al., 1964).	187

Figura 36: Diagrama de fases do sistema FeO-TiO ₂ (Erickson e Pelton, 1992).	187
Figura 37: Diagrama de fases calculado para o sistema Al ₂ O ₃ -TiO ₂ .	203
Figura 38: Desvio relativo em G_m para o óxido Al ₂ TiO ₅ .	205
Figura 39: Diagrama de fases calculado para o sistema MgO-TiO ₂ .	208
Figura 40: Diagrama de fases calculado para o sistema MgO-TiO ₂ (reações invariantes envolvendo exclusivamente a escória).	208
Figura 41: Desvio relativo em G_m para o óxido FeTiO ₃ .	210
Figura 42: Desvio relativo em G_m para o óxido MgTi ₂ O ₅ .	210
Figura 43: Desvio relativo em G_m para o óxido Mg ₂ TiO ₄ .	210
Figura 44: Diagrama de fases calculado para o sistema MnO-TiO ₂ .	212
Figura 45: Diagrama de fases calculado para o sistema MnO-TiO ₂ (energia de Gibbs do MnO líquido modificada).	214
Figura 46: Atividades químicas calculadas para o sistema MnO-TiO ₂ ($T = 1773$ K).	215
Figura 47: Atividades químicas calculadas para o sistema MnO-TiO ₂ ($T = 1823$ K).	216
Figura 48: Sensibilidade térmica das atividades químicas na escória MnO-TiO ₂ .	216
Figura 49: Atividades químicas calculadas para o sistema MnO-TiO ₂ ($T = 1873$ K).	217
Figura 50: Desvio relativo em G_m para o óxido MnTiO ₃ .	219
Figura 51: Desvio relativo em G_m para o óxido Mn ₂ TiO ₄ .	219
Figura 52: Diagrama de fases calculado para o sistema FeO-TiO ₂ .	222
Figura 53: Ampliação do diagrama de fases calculado para o sistema FeO-TiO ₂ .	222
Figura 54: Atividades químicas calculadas a 1748 K para o sistema FeO-TiO ₂ .	224
Figura 55: Desvio relativo em G_m para o óxido Fe ₂ TiO ₄ .	225
Figura 56: Desvio relativo em G_m para o óxido FeTiO ₃ .	225
Figura 57: Desvio relativo em G_m para o óxido FeTi ₂ O ₅ .	226

Lista de símbolos alfabéticos

A :	Energia de Helmholtz
a_i :	Atividade química do componente i
a_i^α :	Atividade química do componente i na fase α .
C :	Número total de componentes
C_p :	Capacidade térmica à pressão constante
C_v :	Capacidade térmica a volume constante
C_p° :	Capacidade térmica padrão a pressão constante
$C_{p,m}^\circ$:	Capacidade térmica molar padrão a pressão constante
$C_p^\circ(i, s, T)$:	Capacidade térmica à pressão constante padrão do composto i em sua forma cristalina mais estável
$C_p^{\circ,\alpha}$:	Capacidade térmica à pressão constante padrão da fase α
dQ :	Calor reversível fornecido ao sistema
dW_{exp} :	Trabalho expansivo reversível realizado sobre o sistema
dW_q :	Trabalho químico reversível realizado sobre o sistema
E :	Estado energético quantizado acessível ao sistema
E^* :	Estado energético externo de maior probabilidade ocupacional
E_{AB} :	Energia de interação entre dois átomos primeiros-vizinhos A e B
F :	Número de fases presentes no equilíbrio.
h :	Fator de normalização de Guggenheim
k :	Constante de Boltzman
L :	Número de graus de liberdade (variância)
L_{AB} :	Parâmetro energético característico do modelo de solução regular para o binário A - B
M :	Cátion metálico divalente
M_i :	Cátion metálico de valência genérica
n_i :	Número de moles totais do componente i
N_i :	Número de moléculas do componente i
N_t :	Número total de átomos
N_{ij} :	Número de pares ij
n_{ij} :	Número de moles de pares ij

n_{AB}^*	Número de moles de pares AB calculados para uma distribuição espacial aleatória
n_{AB}^e	Número de moles de pares AB no equilíbrio
n	Vetor de número de moles de dimensão igual a C .
n^α	Vetor de número de moles da fase α de dimensão igual a C
n_t^α	Número total de moles da fase α
n_t	Número total de moles
n_i^α	Número de moles do componente i na fase α
n_{O^0}	Número de moles de átomos de oxigênio ligados covalentemente a dois átomos de Si
$n_{O^{-1}}$	Número de moles de poli-íons de silício
$n_{O^{-2}}$	Número de moles de ânions oxigênio
N_v	Número de variáveis a serem calculadas no equilíbrio
N_e	Número de equações a serem satisfeitas simultaneamente no equilíbrio
n_r	Número de reações químicas independentes
G	Energia de Gibbs
G^α	Energia de Gibbs da fase α
$G^{0,\alpha}$	Energia de Gibbs padrão da fase α
G_i^α	Energia de Gibbs da fase α contendo exclusivamente o componente i
G_m	Energia de Gibbs molar
G_m	Energia de Gibbs molar padrão
$G_{m,i}$	Energia de Gibbs molar do componente i na forma pura
G	Energia de Gibbs molar da fase α
G_m^{ex}	Energia de Gibbs molar de excesso
H	Entalpia
H^α	Entalpia da fase α
$H^{0,\alpha}$	Entalpia padrão da fase α
H_m	Entalpia molar
H_m^α	Entalpia molar da fase α
H_m^{ex}	Entalpia molar de excesso

$H_{298}(i)$:	Entalpia padrão de formação do composto i
$K_{1,x}$:	Constante de equilíbrio associada à reação entre um ânion orto-silicato e um poli-ion de grau de polimerização igual a x
P :	Pressão hidroestática
P^α :	Pressão hidroestática da fase α
q_o :	Função de partição canônica interna da espécie O^{-2}
q_x :	Função de partição canônica interna de um poli-ion de Si de x segmentos
r :	Número de moles de células Va-O-Si no equilíbrio
R :	Constante universal dos gases
R_{1S} :	Número de moles de células M_1 -O-Si
$R_{11,SS}$:	Número de células Si-O-Si primeira vizinhas a uma célula M_1 -O- M_1
S :	Entropia
$S_{298}(i)$:	Entropia padrão do composto i a 298 K
S^α :	Entropia da fase α
S_m :	Entropia molar
S_m^α :	Entropia molar da fase α
S_m^{ex} :	Entropia molar de excesso
T :	Temperatura absoluta em K
T^α :	Temperatura absoluta da fase α
$T^{\alpha\beta}$:	Temperatura absoluta de transição entre as formas alotrópicas α e β
T^{fus} :	Temperatura de fusão
U :	Energia interna
U^α :	Energia interna da fase α
V :	Volume total
V^α :	Volume da fase α
V_m :	Volume molar
V_m^α :	Volume molar da fase α
x :	Grau de polimerização de um poli-ion de Si
X_i :	Fração molar do componente i ou cátion de natureza i
X_i^α :	Fração molar do componente i na fase α

X_i^{igm} :	Fração molar do componente i em uma mistura de gases ideais
X_{O° :	Fração molar de pontes covalentes Si-O-Si
X_{O^-} :	Fração molar de poli-ions de silício
$X_{\text{O}^{2-}}$:	Fração molar de ânions O^{2-}
X_{SiSi} :	Fração molar de pares de átomos de Si segundos vizinhos
X_{SiO_4} :	Fração molar de ânion orto-silicato no equilíbrio
X_{IS} :	Fração molar de células M1-O-Si
$X_{\text{I1,SS}}$:	Probabilidade de se encontrar uma célula Si-O-Si primeira-vizinha a uma célula M1-O-M1
X_t :	Número total de ânions por mol de solução
W_{AB} :	Variação de energia associada à formação de um mol de pares AB
Z :	Número de coordenação

Lista de símbolos gregos

α_2 :	Grau de polimerização linear
α_p :	Coefficiente de expansão térmica
β_T :	Compressibilidade isotérmica
δQ :	Quantidade de calor infinitesimal fornecida ao sistema
δQ^* :	Calor não compensado
δW_{exp} :	Trabalho expansivo irreversível
δW_q :	Trabalho químico irreversível
$\delta G_K(T)$:	Desvio energético relativo em G_m do composto K para a temperatura T
μ_i :	Potencial químico do componente i
μ_i^α :	Potencial químico do componente i na fase α .
λ^α :	Multiplicador de indeterminado de Lagrange associado à fase α
Ω :	Degenerescência configuracional
ΔC_p^{fus} :	Variação de capacidade térmica à pressão constante durante a fusão
ΔA^{mix} :	Variação de energia de Helmholtz de mistura

ΔA_m^{mix} :	Varição de energia de Helmholtz molar de mistura
ΔG_m^{mix} :	Varição de energia de Gibbs molar de mistura
$\Delta G_m^{\text{mix,im}}$:	Varição de energia de Gibbs molar de mistura ideal
$\Delta G_m^{\text{mix,igm}}$:	Varição de energia de Gibbs molar de mistura para uma mistura de gases ideais
$\Delta G^{\text{mix},\alpha}$:	Varição de energia de Gibbs de mistura da fase α
ΔG_p° :	Varição de energia de Gibbs molar para a formação de pontes covalentes Si-O-Si
ΔH_m^{mix} :	Varição de entalpia molar de mistura
$\Delta H_m^{\text{mix,igm}}$:	Varição de entalpia molar de mistura para uma mistura de gases ideais
$\Delta H^{\alpha\beta}$:	Entalpia de transição entre as formas alotrópicas α e β
ΔH^{fus} :	Varição de entalpia de fusão
$\Delta H_{r,f}^{\circ}(i,T)$:	Varição de entalpia reacional padrão de formação do composto i na temperatura T
ΔT :	Perturbação quase-estática de temperatura
ΔS :	Perturbação quase-estática entrópica
ΔS_m^{mix} :	Varição de entropia molar de mistura
$\Delta S_m^{\text{mix,igm}}$:	Varição de entropia molar de mistura para uma mistura de gases ideais
ΔS_m^{α} :	Perturbação quase-estática da entropia molar da fase α .
$\Delta S^{\alpha\beta}$:	Entropia de transição entre as formas alotrópicas α e β
ΔS^{fus} :	Varição de entropia de fusão
ΔV :	Perturbação quase-estática do volume total
ΔV_m^{α} :	Perturbação quase-estática do volume molar da fase α
ΔV_m^{mix} :	Varição de volume molar de mistura
$\Delta V_m^{\text{mix,igm}}$:	Varição de volume molar de mistura para uma mistura de gases ideais
ΔP :	Perturbação quase-estática de pressão hidroestática
ΔX_i^{α} :	Varição da fração molar do componente i na fase α para
Γ :	Função de partição canônica
Γ^{mix} :	Função de partição canônica de mistura