

<sup>1</sup>Е.К. Мухамбетгалиев\*, <sup>1</sup>Т.Т. Жүнісқалиев, <sup>1</sup>А.Қ. Смағұлов, <sup>2</sup>С.А. Смаилов

<sup>1</sup>Химико-металлургический институт им. Ж. Абишева, Караганда, Казахстан

<sup>2</sup>Карагандинский индустриальный университет, Темиртау, Казахстан

\*e-mail: [ye.kenzhegaliuly@gmail.com](mailto:ye.kenzhegaliuly@gmail.com)

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВЫПЛАВКИ СПЛАВА ИЗ ВЫСОКОАКТИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ AL-MN-CA-SI

**Аннотация.** В работе приводятся результаты термодинамического моделирования процесса выплавки комплексного сплава из высокоактивных элементов Al-Mn-Ca-Si. Термодинамическое моделирование выполнено с помощью универсальной программы расчёта многокомпонентных гетерогенных систем Terra, обладающей собственной базой термодинамических свойств индивидуальных веществ. Так как проведенный предварительный расчет на основе стандартной базы данных показал отличие состава продуктов от ожидаемого, отсутствующие термодинамические функции веществ нами были взяты из базы данных HSC Chemistry 5.1. Исходные условия для моделирования выплавки сплава: интервал температур 700 - 2800°C, давление 0,1 МПа.

Исходная шихтовая смесь состояла из угля месторождения Сарыадыр, марганцевой руды месторождения Есымжал и извести. По результатам термодинамического моделирования установлено, что оптимальный выход металла достигается в диапазоне температур 1400-2000°C, а для эффективности рафинирования стали от неметаллических включений наиболее приемлемым будет состав комплексного сплава, содержащего 20-50% кремния, 9,27% алюминия, 12-45% марганца, 3-20% кальция, 0,01-0,5% фосфора, 0,05-1,5 углерода и 5-20% железа.

**Ключевые слова:** высокосолеальный уголь, марганцевая руда, термодинамическое моделирование, программа Terra, оптимальный состав, комплексный сплав.

**Введение.** Производство качественной стали невозможно без развития и совершенствования производства ферросплавов. В свою очередь проведение исследований и разработка технологии производства качественной стали путем её обработки и рафинирования сплавом из высокоактивных элементов Al-Mn-Ca-Si позволяет значительно расширить сортамент сталей для машиностроения и резко сократить отбраковку стальных изделий по основным дефектам – нераскисленность, излом по скоплению неметаллических включений, красноломкость и хладноломкость. Производство качественной стали позволит поднять производство комплектующих и запасных частей для машин горнодобывающей отрасли Казахстана, импортируемые на сегодняшний день извне.

Новые сплавы, содержащие высокоактивные элементы – это, прежде всего многокомпонентные ферросплавы, содержащие наряду с широко применяемыми элементами новые компоненты в наиболее благоприятных сочетаниях. Их физико-химические свойства должны способствовать необходимому воздействию на расплав при меньшем расходе по сравнению со стандартными сплавами или давать больший эффект при одинаковом расходе [1, 2]. При этом должна быть обеспечена возможность: увеличения выпуска ферросплавов без введения дополнительных мощностей агрегатов; уменьшения расхода сплавов потребителями; повышения качества обрабатываемой стали. Поэтому, решение данной задачи имеет большое значение не только с позиции практики, но и с общенаучной точки зрения с выявлением механизма восстановления ведущих элементов в многокомпонентной системе, установлением оптимальных вещественных составов и количественном соотношении компонентов в сплаве, а также при наличии рациональной и экономичной технологии получения комплексных ферросплавов

При производстве комплексных ферросплавов методами металлургической плавки в условиях руднотермических печей происходит восстановление всех компонентов шихты. Однако производство и применение таких комплексных сплавов представляют собой

сложную технологическую схему. Во-первых, она связана с разработкой технологии их производства; во-вторых, с получением рациональных составов сплавов, обеспечивающих достаточное высокое сквозное извлечение активных элементов из сырья. В этой связи перспективным направлением развития ферросплавной промышленности Казахстана является разработка научных основ и технологии производства комплексных сплавов углеродотермическим способом с вовлечением в металлургический передел некондиционного сырья, таких как высокозольные угли, не используемые в энергетических целях и железомарганцевые руды [3, 4].

Термодинамическое моделирование – численное определение равновесного состава и свойств исследуемой реальной системы в квазиравновесных или неравновесных процессах, или состояниях. Основные причины, которые привели к созданию термодинамического моделирования [5]. Модель термодинамического равновесия широко используется в научной и производственной практике при изучении поведения сложных по химическому составу систем при повышенных температурах, когда существенную роль играют химические и (или) фазовые превращения. В химико-технологических процессах основной задачей моделирования является определение состава компонентов и фаз. Для реальных процессов, несомненно, допущение о фазовом и химическом равновесии является предельной оценкой состояний, но даже такая информация играет неопределимую роль при анализе малоизученных систем [6, 7].

Достоинством термодинамического метода является его универсальный характер, позволяющий исследовать произвольные по химическому составу системы на основании одной только справочной информации о термохимических и термодинамических свойствах индивидуальных веществ – компонентов равновесия. Эти свойства известны для широкого спектра химических соединений, находящихся в газообразном, конденсированном и ионизированном состоянии, в температурном диапазоне, характерном для большинства инженерных приложений. Однако физическая прозрачность модели сочетается с вычислительными сложностями обобщенного алгоритма, трудностями подготовки исходных данных и представления множества результатов. Эти обстоятельства затрудняют практическую реализацию метода в частных случаях, а обращение к коммерческим системам моделирования уменьшает оперативность получения результатов в широком диапазоне изменения параметров [8-10].

**Методы.** Для термодинамического анализа процесса использована универсальная программа расчета многокомпонентных гетерогенных систем TERRA, созданная на основе программы АСТРА-4, предложенная профессором Трусовым Б.Г. из Бауманского ГТУ [11-13]. Программа Terra работает на операционных системах Windows XP и выше. В основе многоцелевого программного комплекса Terra лежит универсальный термодинамический метод определения характеристик равновесия и произвольных гетерогенных систем, основанные на фундаментальном принципе максимума энтропии [14]. Термодинамическое моделирование с программной системой Terra предоставляет собой единственную возможность обобщенного описания любого высокотемпературного состояния с помощью одних только законов термодинамики, независимо от условий существования или области применения, требуя минимум информации о самой системе и ее окружении. Программа Terra обладает собственной базой термодинамических свойств индивидуальных веществ. В базе данных (БД) термодинамических данных записаны свойства более 3000 индивидуальных веществ, образованных, 65 элементами в интервале температур 300-6000°K. Основу базы данных составляют термохимические свойства веществ, систематизированные в основном Институтом высоких температур РАН и Национальным бюро стандартов США. Но результаты расчетов, проведенных с помощью стандартной БД, показали существенное отличие состава продуктов от ожидаемого. Так, в металле, шлаке и газе отсутствовали многие соединения марганца, кремния, алюминия и кальция. Отсутствующие термодинамические функции веществ нами взяты из базы данных HSC Chemistry 5.1 [15-17].

Так, возможными компонентами конденсированных фаз считались: Fe(c); FeO(c); Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(c); Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(c); FeS(c); FeS<sub>2</sub>(c); Fe<sub>3</sub>C(c); Fe<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>(c); FeSiO<sub>3</sub>(c); FeAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>(c); FeSi(c); FeSi<sub>2</sub>(c); Fe<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>(c); Fe<sub>3</sub>Si(c); FeAl(c); FeAl<sub>2</sub>(c); FeAl<sub>3</sub>(c); Mn(c); MnO(c); MnO<sub>2</sub>(c); Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(c); Mn<sub>2</sub>O<sub>7</sub>(c); Mn<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(c); MnS(c); MnS<sub>2</sub>(c); Mn<sub>3</sub>C(c); Mn<sub>7</sub>C<sub>3</sub>(c); MnSi<sub>2</sub>(c); Mn<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>(c); Si(c); SiO<sub>2</sub>(c); SiS(c); SiS<sub>2</sub>(c); SiC(c); Al(c); Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(c); Al<sub>2</sub>OC(c); Al<sub>2</sub>S<sub>3</sub>(c); Al<sub>4</sub>C<sub>3</sub>(c); Al<sub>4</sub>O<sub>4</sub>C(c); AlP(c); Al<sub>6</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>13</sub>(c); Ca<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>(c); Ca(c); CaO(c); CaS(c); CaSO<sub>4</sub>(c); CaP<sub>2</sub>O<sub>6</sub>(c); Ca<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>(c); Ca<sub>3</sub>P<sub>2</sub>O<sub>8</sub>(c); CaC<sub>2</sub>(c); CaCO<sub>3</sub>(c); CaSiO<sub>3</sub>(c); Ca<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>(c); Ca<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub>(c); CaTiO<sub>3</sub>(c); Ca<sub>3</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub>(c); CaSi(c); CaSi<sub>2</sub>(c); CaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>(c); CaAl<sub>4</sub>O<sub>7</sub>(c); Ca<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>5</sub>(c); CaFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>(c); CaAl<sub>4</sub>(c); CaAl<sub>2</sub>(c); Ca<sub>2</sub>MgSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub>(c); CaMgSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub>(c); Ca<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>SiO<sub>7</sub>(c); CaAl<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>8</sub>(c); Mg(c); MgO(c); MgS(c); MgSO<sub>4</sub>(c); MgC<sub>2</sub>(c); Mg<sub>2</sub>C<sub>3</sub>(c); MgCO<sub>3</sub>(c); Mg<sub>2</sub>Si(c); MgSiO<sub>3</sub>(c); Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>(c); MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>(c); MgTiO<sub>3</sub>(c); MgTi<sub>2</sub>O<sub>5</sub>(c); Mg<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub>(c); MgP<sub>2</sub>O<sub>6</sub>(c); Mg<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>(c); Mg<sub>3</sub>P<sub>2</sub>O<sub>8</sub>(c); Ti(c); TiO(c); TiO<sub>2</sub>(c); Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(c); Ti<sub>3</sub>O<sub>5</sub>(c); Ti<sub>4</sub>O<sub>7</sub>(c); TiS(c); TiS<sub>2</sub>(c); TiC(c); TiSi(c); TiSi<sub>2</sub>(c); Ti<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>(c); P(c); P<sub>4</sub>O<sub>10</sub>(c); S(c); C(c); для газовой фазы предполагалось присутствие - Fe; FeO; FeO<sub>2</sub>; FeS; Mn; MnO; MnO<sub>2</sub>; MnS; Si; Si<sub>2</sub>; Si<sub>3</sub>; SiO<sub>2</sub>; SiS; SiS<sub>2</sub>; SiC; SiC<sub>2</sub>; Si<sub>2</sub>C; Si<sub>2</sub>C<sub>2</sub>; Si<sub>3</sub>C; SiO; Al; Al<sub>2</sub>; AlO<sub>2</sub>; Al<sub>2</sub>O; Al<sub>2</sub>O<sub>2</sub>; Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; AlS; AlS<sub>2</sub>; Al<sub>2</sub>S; Al<sub>2</sub>S<sub>2</sub>; AlC; AlC<sub>2</sub>; Al<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub>; Al<sub>2</sub>C<sub>2</sub>; AlO; Al<sub>6</sub>Si<sub>12</sub>O<sub>13</sub>; Ca; Ca<sub>2</sub>; CaO; CaS; Mg; Mg<sub>2</sub>; MgO; MgS; Ti; TiO; TiO<sub>2</sub>; TiS; TiS<sub>2</sub>; P; P<sub>2</sub>; P<sub>3</sub>; P<sub>4</sub>; PO; PO<sub>2</sub>; P<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; P<sub>2</sub>O<sub>4</sub>; P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>; P<sub>3</sub>O<sub>6</sub>; P<sub>4</sub>O<sub>6</sub>; P<sub>4</sub>O<sub>7</sub>; P<sub>4</sub>O<sub>8</sub>; P<sub>4</sub>O<sub>9</sub>; P<sub>4</sub>O<sub>10</sub>; PS; S; S<sub>3</sub>; S<sub>4</sub>; S<sub>5</sub>; S<sub>6</sub>; S<sub>7</sub>; S<sub>8</sub>; SO; SO<sub>2</sub>; SO<sub>3</sub>; S<sub>2</sub>O; C; C<sub>2</sub>; C<sub>3</sub>; C<sub>4</sub>; C<sub>5</sub>; CO; CO<sub>2</sub>; C<sub>2</sub>O; C<sub>3</sub>O<sub>2</sub>; CS; CS<sub>2</sub>; COS; CP; O; O<sub>2</sub>; Ar. В качестве исходных данных для моделирования выплавки комплексного сплава из высокоактивных элементов Al-Mn-Ca-Si выбрали следующие условия: интервал температур - 700 - 2800°C; давление - 0,1 Мпа.

Производственная шихта является многокомпонентной, где могут протекать десятки и сотни реакций. По этой причине выполнили полный термодинамический анализ с использованием программного комплекса Terra. Предварительной для этого является расчетная стадия подготовки шихты, которую использовали для проведения крупно-лабораторных испытаний с использованием марганцевой руды месторождения Есымжал, высокозольных углей месторождений Сарыадыр и Борлы, а также извести. Расчет произвели для смеси содержащей уголь месторождения Сарыадыр (20 кг), марганцевую руду месторождения Есымжал (9 кг) и известь в количестве 3 кг. Химический состав и технический анализ исходной шихты представлен в таблице 1.

Таблица 1. Технический состав и химический анализ исходной шихты.

Материал	Содержание, масс. %										
	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	MnO <sub>2</sub>	CaO	MgO	TiO <sub>2</sub>	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	S <sub>общ</sub>	W	ППП
Мн руда Есымжал	3,28	9,27	0,82	56,94	17,20	0,71	-	0,017	0,014	0,30	11,74
Известь	1,71	0,43	0,32	-	66,59	1,50	-	0,020	0,003	0,30	29,12
Уголь Сарыадыр	6,58	60,44	28,70	-	1,42	1,08	1,01	0,050	0,710	1,88	-

**Результаты и их обсуждение.** Зольность угля месторождения Сарыадыр составляла 44,20%, летучие вещества 20,74%, а содержание твердого углерода 35,06%. При проведении расчета в программе TERRA, в сплаве были следующие металлические фазы: Mn<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>; MnS; Mn<sub>7</sub>C<sub>3</sub>; Fe<sub>3</sub>C; FeSi; CaAl<sub>4</sub>; CaAl<sub>2</sub>; CaC<sub>2</sub>; CaSi<sub>2</sub>; CaS; TiC; C, а в шлаке получили следующие конденсированные фазы: Ca<sub>2</sub>MgSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub>; CaMgSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub>; Ca<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>SiO<sub>7</sub>; FeSiO<sub>3</sub>; FeAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>; SiO<sub>2</sub>; Ca<sub>3</sub>P<sub>2</sub>O<sub>8</sub>; CaCO<sub>3</sub>; CaSiO<sub>3</sub>; Ca<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub>; CaTiO<sub>3</sub>; MnO; TiO<sub>2</sub>; Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; Ti<sub>4</sub>O<sub>7</sub>.

Согласно результатам термодинамического моделирования оптимальной выход металла достигается в диапазоне температур 1400-2000°C (рисунок 1).

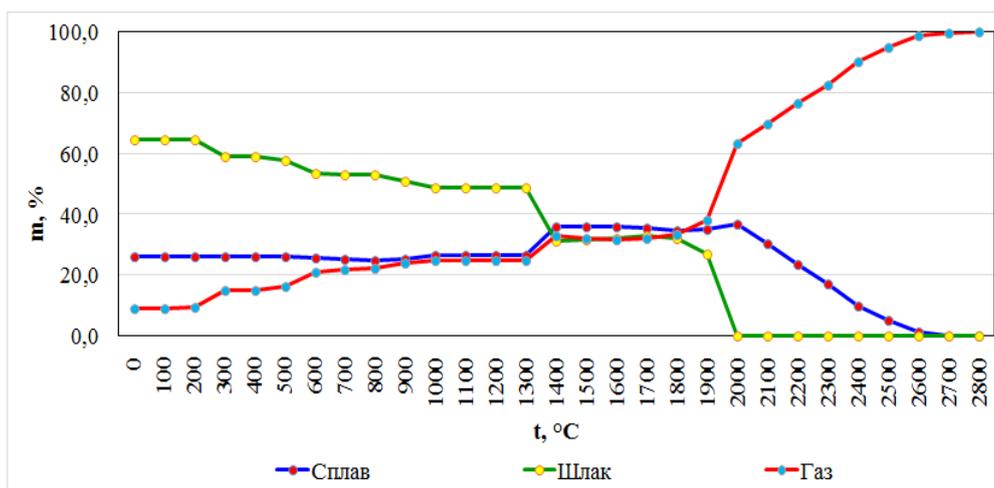


Рис. 1. Выход продуктов при термодинамическом моделировании в программе Terra

На рисунке 2 приведен состав металла при переводе металлических фаз на элементы в процентном соотношении основных составляющих комплексного сплава. На основании термодинамического моделирования установлено, что основные элементы начинают переходить в состав сплава при 1400°C.

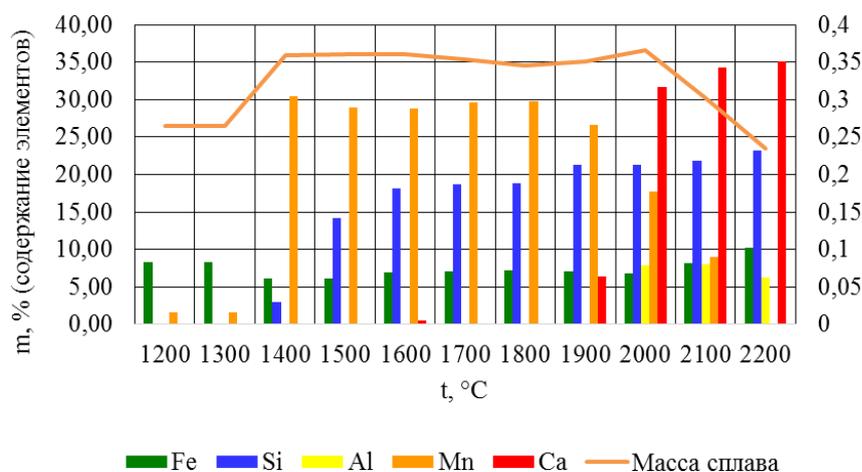


Рис. 2. Состав сплава после термодинамического моделирования

Восстановление кремния начинается при 1400°C и с повышением температуры его содержание в составе сплава увеличивается.

Для марганца наблюдается аналогичная картина при 1800°C его содержание в составе сплава достигает 30%, в основном содержится в виде бинарного соединения  $Mn_5Si_3$ .

Переход кальция и алюминия в состав сплава начинается при 1900°C. При этом содержание железа в сплаве колеблется в пределах 6-8%.

**Выводы.** Анализируя результаты термодинамического моделирования для достижения эффективности рафинирования стали от неметаллических включений и вредных примесей как S и P, технологичности получения наиболее приемлемым будет состав комплексного сплава содержащего 20-50% кремния, 9,27% алюминия, 12-45% марганца, 3-20% кальция, 0,01-0,5% фосфора, 0,05-1,5 углерода и 5-20% железа.

**Источник финансирования.** Статья публикуется в рамках выполнения проекта ИРН AP08052301 «Разработка технологии производства качественного стального литья путем её ҚазҰТЗУ хабаршысы №6 2021

обработки и рафинирования от неметаллических включений сплавом из высокоактивных элементов Al-Mn-Ca-Si» грантового финансирования научных исследований КН МОН РК.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Бородаенко Л.Н., Такенов Т.Д., Габдуллин Т.Г. Электротермия комплексных сплавов с активными элементами. - Алма-Ата: Гылым, 1990. - 120 с.
- [2] Жучков В.И., Заякин О.В. Разработка состава и процесса получения многокомпонентных ферросплавов // Известия высших учебных заведений. Черная металлургия, 2020. – № 10. – С. 791-795.
- [3] Mukhambetgaliev E. K., Esenzhulov A. B., Roshchin V. E. Alloy production from high-silica manganese ore and high-ash Kazakhstan coal, *Steel in Translation*, 2018, Vol. 48, No. 9, pp. 547-552.
- [4] Mukhambetgaliev E.K., Roshchin, V.E., Baisanov, S.O. Analytical expressions for Fe – Si – Al – Mn metal system and phase composition of aluminosilicomanganese, (2018) *Izvestiya Ferrous Metallurgy*, 61 (7), pp. 564-571.
- [5] Нохрина О.И., Рожихина И.Д., Рыбенко И.А., Ходосов И.Е. Разработка основ энергоэффективных процессов металлизации с использованием термодинамического моделирования // Известия высших учебных заведений. Черная металлургия, 2016. – № 4. – С. 237-244.
- [6] Белов Г.В., Трусов Б.Г. Термодинамическое моделирование химически реагирующих систем. - М.: МГТУ имени Н.Э. Баумана, 2013. - 96 с.
- [7] Акимов Е.Н., Сенин А.В., Рощин В.Е. Термодинамический анализ получения низкоуглеродистого феррохрома с применением модели ассоциированных растворов // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Металлургия», 2013. – № 1. – С. 182-185.
- [8] Трофимова Е.А., Габова А.Ю. Термодинамический анализ условий образования карбида кремния в сложных металлических расплавах // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Металлургия», 2015. – № 1. – С. 5-10.
- [9] Колесников А.С., Сергеева И.В., Ботабаев Н.Е., Альжанова А.Ж., Аширбаев Х.А. Термодинамическое моделирование химической и фазовых превращений в системе окисленная марганцевая руда – углерод // Известия высших учебных заведений. Черная металлургия, 2017. – № 9. – С. 759-765.
- [10] A. Akberdin, A. Kim, R. Sultangaziyev, M. Karbayev. Thermodynamic modeling of the borbarium ferroalloy smelting technological process // *Metalurgija* 59 (2020) 3. – pp. 333-336.
- [11] Trusov B.G. TERRA software system for modeling phase and chemical equilibria in plasma-chemical systems. 3rd International Symposium on Theoretical and Applied Plasma Chemistry. Collection of materials. – V.I. – Ivanovo (2002), pp. 217-220.
- [12] Pupyshv A.A. Thermodynamic modeling of thermochemical processes in spectral sources, Yekaterinburg: GOU VPO UGTU–UPI (2007), 85.
- [13] Belov G.V., Trusov B.G. Thermodynamic modeling of chemically reacting systems, MGTU named after Bauman (2013), 96 с.
- [14] Михайлов Г.Г., Вяткин Г.П., Макровец Л.А., Самойлова О.В., Бакин И.В. Термодинамический анализ процессов взаимодействия компонентов в системе Fe–Sr–Ca–O–C в условиях существования металлического расплава // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Металлургия», 2020. – № 4. – С. 5-13.
- [15] NIST Chemistry Webbook / National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce, – URL: <https://webbook.nist.gov/> (дата обращения 2018-12-15).
- [16] Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание в 4-х томах. Под редакцией В.П. Глушко. - М.: Наука, 1982. – 210 с.
- [17] Бердников В.И., Гудим Ю.А. Анализ термодинамических свойств расплава кальций-кремний-железо // Известия высших учебных заведений. Черная металлургия, 2019. – № 12. – С. 957-963.

#### REFERENCES

- [1] Borodaenko L.N., Takenov T.D., Gabdullin T.G. Jelektrotermija kompleksnyh splavov s aktivnymi jelementami. - Alma-Ata: Gylym, 1990. - 120 p.
- [2] Zhuchkov V.I., Zajakin O.V. Razrabotka sostava i processa poluchenija mnogokomponentnyh ferrosplavov // *Izvestija vysshih uchebnyh zavedenij. Chernaja metallurgija*, 2020. – № 10. – pp. 791-795.
- [3] Mukhambetgaliev E. K., Esenzhulov A. B., Roshchin V. E. Alloy production from high-silica

manganese ore and high-ash Kazakhstan coal, *Steel in Translation*, 2018, Vol. 48, No. 9, pp. 547-552.

[4] Mukhambetgaliev, E.K., Roshchin, V.E., Baisanov, S.O. Analytical expressions for Fe – Si – Al – Mn metal system and phase composition of aluminosilicomanganese, (2018) *Izvestiya Ferrous Metallurgy*, 61 (7), pp. 564-571.

[5] Nohrina O.I., Rozhihina I.D., Rybenko I.A., Hodosov I.E. Razrabotka osnov jenergojeffektivnyh processov metallizacii s ispol'zovaniem termodinamicheskogo modelirovaniya // *Izvestiya vysshih uchebnyh zavedenij. Chernaja metallurgija*, 2016. – № 4. – pp. 237-244.

[6] Belov G.V., Trusov B.G. Termodinamicheskoe modelirovanie himicheski reagirujushhih sistem. - M.: MGTU imeni N. Je. Baumana, 2013. - 96 p.

[7] Akimov E.N., Senin A.V., Roshhin V.E. Termodinamicheskij analiz poluchenija nizkouglerodistogo ferrohroma s primeneniem modeli associirovannyh rastvorov // *Vestnik JuUrGU. Ser. «Metallurgija»*, 2013. – № 1. – pp. 182-185.

[8] Trofimova E.A., Gabova A. Ju. Termodinamicheskij analiz uslovij obrazovaniya karbida kremnija v slozhnyh metallicheskih rasplavah // *Vestnik JuUrGU. Ser. «Metallurgija»*, 2015. – № 1. – pp. 5-10.

[9]. Kolesnikov A.S., Sergeeva I.V., Botabaev N.E., Al'zhanova A.Zh., Ashirbaev H.A. Termodinamicheskoe modelirovanie himicheskij i fazovyh prevrashhenij v sisteme okslennaja margancevaja ruda – uglerod // *Izvestiya vysshih uchebnyh zavedenij. Chernaja metallurgija*, 2017. – № 9. – pp. 759-765.

[10] A. Akberdin, A. Kim, R. Sultangaziyev, M. Karbayev. Thermodynamic modeling of the borbarium ferroalloy smelting technological process // *Metallurgija* 59 (2020) 3. – pp. 333-336.

[11] Trusov B.G. TERRA software system for modeling phase and chemical equilibria in plasma-chemical systems. 3rd International Symposium on Theoretical and Applied Plasma Chemistry. Collection of materials. – V.I. – Ivanovo (2002). – pp. 217-220.

[12] Pupyshev A.A. Thermodynamic modeling of thermochemical processes in spectral sources, Yekaterinburg: GOU VPO UGTU–UPI (2007), 85 p.

[13] Belov G.V., Trusov B.G. Thermodynamic modeling of chemically reacting systems, MGTU named after Bauman (2013), 96 p.

[14] Mihajlov G.G., Vjatkin G.P., Makrovec L.A., Samojlova O.V., Bakin I.V. Termodinamicheskij analiz processov vzaimodejstvija komponentov v sisteme Fe–Sr–Ca–O–C v uslovijah sushhestvovaniya metallicheskogo rasplava // *Vestnik JuUrGU. Ser. «Metallurgija»*, 2020. – № 4. – pp. 5-13.

[15] NIST Chemistry Webbook / National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce, - URL: <https://webbook.nist.gov/> (data obrashheniya 2018-12-15).

[16] Gurvich L.V., Vejc I.V., Medvedev V.A. i dr. Termodinamicheskie svojstva individual'nyh veshhestv: Spravochnoe izdanie v 4-h tomah. Pod redakciej V.P. Glushko. - M.: Nauka, 1982. - 210 p.

[17] Berdnikov V.I., Gudim Ju.A. Analiz termodinamicheskijh svojstv rasplava kal'cij-kremnij-zhelezo // *Izvestiya vysshih uchebnyh zavedenij. Chernaja metallurgija*, 2019. – № 12. – pp. 957-963.

<sup>1</sup>Е.К. Мухамбетғалиев\*, <sup>1</sup>Т.Т. Жүнісқалиев, <sup>1</sup>А.Қ. Смағұлов, <sup>2</sup>С.А. Смаилов

<sup>1</sup>Ж. Әбішев атындағы химия-металлургия институты, Қарағанды, Қазақстан

<sup>2</sup>Қарағанды индустриалдық университеті, Теміртау, Қазақстан

\*e-mail: ye.kenzhegaliuly@gmail.com

## AL-MN-CA-SI ЖОҒАРЫ БЕЛСЕНДІ ЭЛЕМЕНТТЕРІНЕН КҮРДЕЛІ ҚОРЫТПАНЫ БАЛҚЫТУ ПРОЦЕСІН ТЕРМОДИНАМИКАЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

**Андатпа.** Жұмыста Al-Mn-Ca-Si жоғары белсенді элементтерінен кешенді қорытпаны балқыту процесін термодинамикалық модельдеу нәтижелері келтірілген. Термодинамикалық модельдеу жеке заттардың термодинамикалық қасиеттерінің өзіндік негізіне ие көп компонентті гетерогенді жүйелерін есептеудің Терра әмбебап бағдарламасының көмегімен жүзеге асырылды. Стандартты мәліметтер базасына негізделген алдын-ала есептеу өнімнің құрамы мен күтілетін арасындағы айырмашылықты көрсеткендіктен, біз заттардың жетіспейтін термодинамикалық функцияларын HSC Chemistry 5.1 мәліметтер базасынан алдық. Қорытпаны балқытуды модельдеудің бастапқы шарттары: температура аралығы 700-2800°C, қысым 0,1 Мпа.

Бастапқы шихта қоспасы Сарыадыр кен орнының көмірінен, Есімжал кен орнының марганец кені мен әктен тұрды. Термодинамикалық модельдеу нәтижелері бойынша металдың оңтайлы шығымдылығына 1400-2000°C температура диапазонында қол жеткізілетіні, ал болатты металл емес ҚазҰТЗУ хабаршысы №6 2021

қоспалардан тазарту тиімділігі үшін құрамында 20-50% кремний, 9,27% алюминий, 12-45% марганец, 3-20% кальций, 0,01-0,5% фосфор, 0,05-1,5 көміртек және 5-20% темір бар кешенді қорытпаның құрамы қолайлы болатыны анықталды.

**Негізгі сөздер:** жоғары күлді көмір, марганец кені, термодинамикалық модельдеу, Terra бағдарламасы, оңтайлы құрам, кешенді қорытпа.

<sup>1</sup>Ye. K. Mukhambetgaliyev\*, <sup>1</sup>T.T. Zhuniskaliyev, <sup>1</sup>A.K. Smagulov, <sup>2</sup>S.A. Smailov

<sup>1</sup>Chemical and metallurgy institute named after Zh. Abishev, Karaganda, Kazakhstan

<sup>2</sup>Karaganda Industrial University, Temirtau, Kazakhstan

\*e-mail: ye.kenzhegaliuly@gmail.com

### **THERMODYNAMIC MODELING OF THE COMPLEX ALLOY MELTING FROM HIGH-ACTIVE AL-MN-CA-SI ELEMENTS**

**Abstract.** The paper presents the results of thermodynamic modeling of the process of smelting a complex alloy from highly active elements Al-Mn-Ca-Si. Thermodynamic modeling was carried out using the universal program for calculating multicomponent heterogeneous systems Terra, which has its own base of thermodynamic properties of individual substances. Since the preliminary calculation based on the standard database showed that the composition of the products differed from the expected one, we took the missing thermodynamic functions of substances from the HSC Chemistry 5.1 database. Initial conditions for modeling alloy melting: temperature range 700 - 2800°C, pressure 0.1 MPa.

The initial charge mixture consisted of coal from the Saryadyr deposit, manganese ore from the Yesymzhal deposit, and lime. According to the results of thermodynamic modeling, it was found that the optimal metal yield is achieved in the temperature range of 1400-2000 ° C, and for the efficiency of refining steel from non-metallic inclusions, the most acceptable composition of a complex alloy containing 20-50% silicon, 9.27% aluminum, 12-45 % manganese, 3-20% calcium, 0.01-0.5% phosphorus, 0.05-1.5% carbon and 5-20% iron.

**Key words:** high-ash coal, manganese ore, thermodynamic modeling, Terra program, optimal composition, complex alloy.