

Торайғыров университетінің хабаршысы
ҒЫЛЫМИ ЖУРНАЛЫ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
Вестник Торайғыров университета

Торайғыров университетінің ХАБАРШЫСЫ

Энергетикалық сериясы
1997 жылдан бастап шығады



ВЕСТНИК Торайғыров университета

Энергетическая серия
Издается с 1997 года

ISSN 2710-3420

№ 4 (2020)

Павлодар

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
Вестник Торайгыров университета

Энергетическая серия
выходит 4 раза в год

СВИДЕТЕЛЬСТВО

о постановке на переучет периодического печатного издания,
информационного агентства и сетевого издания

№ 14310-Ж

выдано

Министерство информации и общественного развития
Республики Казахстан

Тематическая направленность

публикация материалов в области электроэнергетики,
электротехнологии, автоматизации, автоматизированных и
информационных систем, электромеханики и
теплоэнергетики

Подписной индекс – 76136

Бас редакторы – главный редактор

Кислов А. П.

к.т.н., доцент

Заместитель главного редактора

Талипов О. М., *доктор PhD, доцент*

Ответственный секретарь

Приходько Е. В., *к.т.н., профессор*

Редакция алқасы – Редакционная коллегия

Клецель М. Я., *д.т.н., профессор*
Новожилов А. Н., *д.т.н., профессор*
Никитин К. И., *д.т.н., профессор (Россия)*
Никифоров А. С., *д.т.н., профессор*
Новожилов Т. А., *к.т.н., доцент (Россия)*
Оспанова Н. Н., *к.п.н., доцент*
Нефтисов А. В., *доктор PhD, доцент*
Шокубаева З. Ж. *технический редактор*

За достоверность материалов и рекламы ответственность несут авторы и рекламодатели
Редакция оставляет за собой право на отклонение материалов
При использовании материалов журнала ссылка на «Вестник Торайгыров университета» обязательна

<https://doi.org/10.48081/QCMF8768>**Б. С. Келаманов, А. М. Әбдірашит,****Г. М. Карменова, А. Ж. Идельбаев**

Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті,

Қазақстан Республикасы, Ақтөбе қ.

МАРГАНЕЦ ПЕН ХРОМ НЕГІЗІНДЕГІ ҚОРЫТПАЛАРДЫ БАЛҚЫТУ ҮРДІСІН ТЕРМОДИНАМИКАЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

Мақалада «Terra» бағдарламалық кешенін қолдана отырып, марганец пен хром бар ферроқорытпаларды балқытудың термодинамикалық есептеулерін зерттеу мәселелері қарастырылды. «Terra» бағдарламалық кешенін пайдалана отырып термодинамикалық есептеулерді зерттеу нәтижесінде балқытылатын қорытпалардың құрамын сипаттайтын негізгі конденсацияланған фазалар анықталды. Анықталған фазалардың сипаттамалары және әртүрлі температура интервалдарындағы олардың өзгеру динамикасы зерттелді.

Кілт сөздер: термодинамикалық есептеулер, термодинамикалық модельдеу, диаграмма, тотықсыздану, конденсацияланған фазалар.

Кіріспе

Еркін көп компонентті жүйелердің термодинамикалық тепе-теңдігін есептеу дегеніміз барлық тепе-теңдік параметрлерін, термодинамикалық қасиеттерді, сондай-ақ алынған компоненттердің химиялық және фазалық құрамын анықтау болып табылады. Температура жоғарылап кез-келген күй өзгерістері фазалық, полиморфты және химиялық қайта құрулармен бірге жүрсе, бұл есептеулер қалыпты жағдайлар үшін орындалатын классикалық термодинамиканың тұжырымына қарағанда әлдеқайда күрделі болады. Алайда, іргелі термодинамикалық заңдар кез-келген жүйелер үшін жарамды болып қалатындығына байланысты оларды дұрыс қолдану жалпы жағдайда термодинамикалық тепе-теңдікті есептеу мәселесін шешуге мүмкіндік береді. Бір тәсіл аясында айтарлықтай ерекшеленетін үрдістер мен күйлерді қарастыру зерттелетін объектілердің модельдік сипаттамасын белгілі формализациялаумен ғана мүмкін болады. Қарастырылатын кез-келген термодинамикалық жүйе ондағы химиялық элементтердің салыстырмалы

және абсолютті құрамымен сипатталады (моль/кг). Шарт бойынша, ол еркін күйден тепе-теңдік орнатқан кезде өзгеріссіз қалады және жүйені материалдық объект ретінде сипаттау үшін жеткілікті.

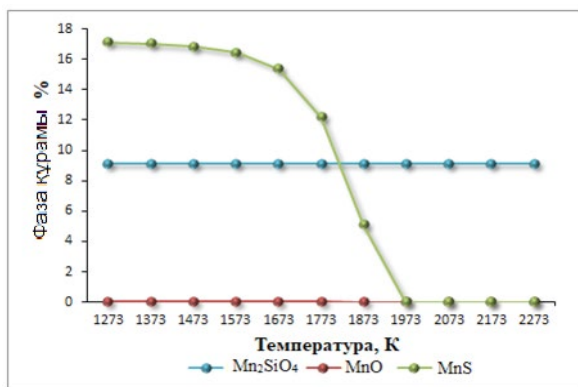
Материалдар мен әдістер

Сипатталған бағдарлама химиялық және фазалық өзгерістері бар еркін жүйелерді есептеуге арналған. Н. Э. Бауман [1–4] атындағы Мәскеу мемлекеттік техникалық университетінде есептеу әдісі мен алгоритмі құрылған бұл бағдарлама тепе-теңдік күйлерін модельдеуге мүмкіндік береді. Бағдарлама жеке заттардың қасиеттерінің ауқымды мәліметтер базасымен ерекшеленеді, бұл оны химиялық құрамы бойынша ерікті композицияларды зерттеуге жарамды етеді. (Астра бағдарламасының) прототиіпімен салыстырғанда бұл бағдарламалық кешен әлдеқайда ыңғайлы пайдаланушы интерфейсіне ие және модельдеу нәтижелерін өңдеу мен көрсетудің жаңа мүмкіндіктерін ұсынады. Зерттелетін жүйеден тұратын химиялық элементтердің шекті саны елуге; бір есептеу кезінде қарастырылатын конденсацияланған фазалардың саны екі жүз; ал тепе-теңдікте пайда болатын газ фазасының компоненттерінің саны (жеке заттардың саны) сегіз жүзге жуық. Гетерогенді жүйелер үшін есептеулер жүргізу кезінде бір компонентті араласпайтын фазалардың модельдерін де, конденсацияланған ерітінділердің модельдерін де қолдануға болады [5–7].

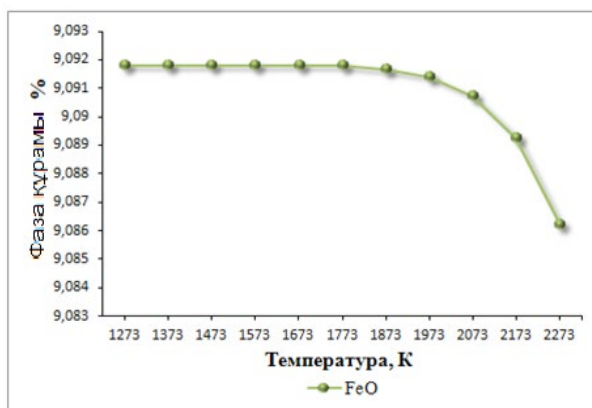
Нәтижелер мен талқылау

Марганец-хром бар қорытпаны балқыту үшін толық термодинамикалық модельдеу (ТТМ) 1273–2273 °С температура аралығында және $P=0,1$ МПа қысымда жүргізілді. Қосылыстардың түзілуін және өзгеруін зерттеу үшін біз «Тетга» бағдарламалық кешенін қолдана отырып, ферросиликомарганец құрамын анықтау термодинамикасын зерттедік. Деректер негізінде температура 2273 °С-ге дейін жоғарылаған кезде негізгі фазалардың пайда болуы, ауысуы және ыдырау үрдістерінің графиктері тұрғызылды. Өртүрлі конденсацияланған фазалардың құрамының өзгеру графиктері 1-ші және 2-ші суреттерде келтірілген. Есептеулер нәтижесінде «Тетга» бағдарламасы шамамен 19 фазалық күйді анықтады, оның ішінде 4 конденсацияланған, 15 конденсацияланбаған. 1-ші суретте көрсетілген марганец бар конденсацияланған фазалар (Mn_2SiO_4 , MnO және MnS) фаза құрамының температураға тәуелділігін білдіреді және Mn_2SiO_4 фазасы барлық зерттелетін температура аралығында тұрақты болады. Зерттелетін температуралық аймақта Mn_2SiO_4 фазасы құрамы шамамен 9 %-ы құрады, ал MnS фазасы құрамы пайда болу температурасында (1273 К) 17 % болса, температура артқан сайын өз мөлшерін баяу азайтады (12 %) және зерттеу температураларының соңында (1973 К) тіпті жоғалады. MnO фазасы басқа конденсацияланған фазалармен салыстырғанда зерттелетін температуралар аймағында өте аз мөлшерде болады және температура 1873 К-ге көтерілгенде

мүлдем жойылады. Зерттелетін температуралар аймағындағы мұндай көрсеткіштер MnS фазасының жоғары температуралар кезінде ыдырауы және тефроит фазасының тұрақты металлқұраушы фаза екендігі дәлелденді. 2-ші суретте темір бар конденсацияланған FeO фазасының температураға тәуелділік графигі көрсетілген. Бұл қисықтың максималды мәні 1273 K температурада 9,0917 % және 1973 K температураға дейін аталған фаза құрамы тұрақты күйде болады. Температураны 2273 K-ге дейін жоғарылату фаза мөлшерінің 9,086 %-ға дейінгі төмендеу шегін көрсетеді. Аталған аз мөлшердегі фаза құрамының өзгерісі темір тотығы құрамындағы оттегінің реакцияға түсуімен түсіндіріледі.

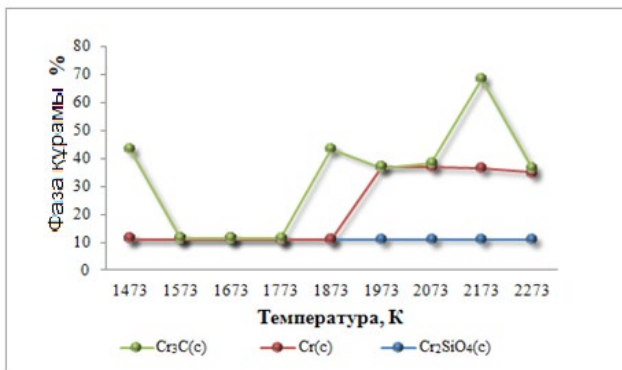


Сурет 1 – Mn₂SiO₄, MnO, MnS конденсацияланған фазалар құрамының температураға тәуелділігі



Сурет 2 – FeO конденсацияланған фаза құрамының температураға тәуелділігі

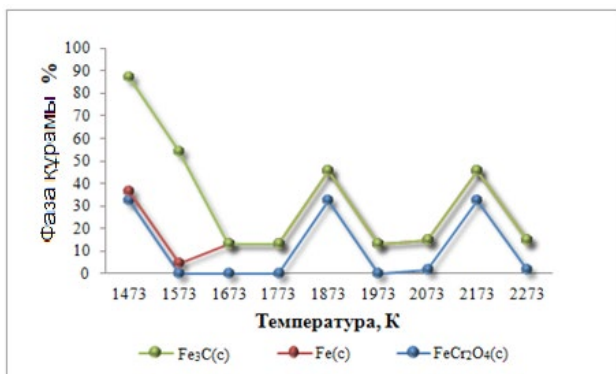
«Тегга» бағдарламасы көмегімен [8–10] құрамында хром бар (феррохром) қорытпаларды есептеу нәтижесінде шамамен 29 фазалық күй алынды, оның ішінде 9 конденсацияланған, 20 конденсацияланбаған фазалар екендігі есептелінді. Әртүрлі конденсацияланған фазалардың құрамының өзгеріс графиктері 3–5-ші суреттерде көрсетілген.



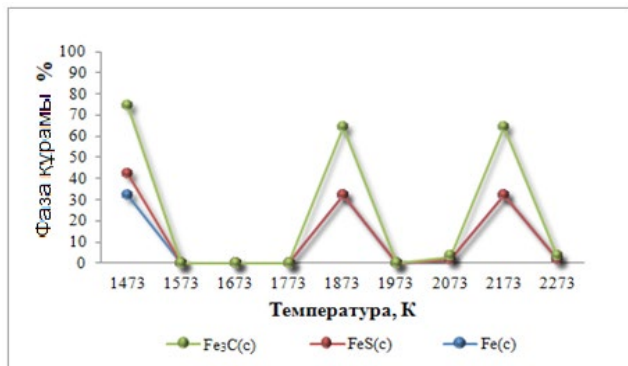
Сурет 3 – Cr_3C , Cr , Cr_2SiO_4 конденсацияланған фазалар құрамының температураға тәуелділігі

3-ші суретте бейнеленген Cr_3C , Cr , Cr_2SiO_4 конденсацияланған фазаларының температураға тәуелділік өзгерістері бірқатар қызықты қисықты графиктермен суреттелген. 1473 К температурада хром карбидінің фазасы құрамы шамамен 45 % құрайды, әрі қарай температураның жоғарылауымен (1573 К) фаза концентрациясы 12 %-ға дейін күрт төмендеп, 1573–1773 К температуралар аралығында конденсацияланған фаза (Cr_3C) 12 % мөлшермен тұрақты күйге ие болады. Температура 1773К-нен жоғарылағанда фаза мөлшері қарқынды өсе бастайды, ал 1873К температурасында шамамен фаза мөлшері 45 %-ға жетеді. 1873–2073 К температура диапазонында зерттелетін фаза құрамының біртіндеп төмендеуі байқалады. Cr_3C фаза құрамы 2073 К температурада 38 %-бен шектеледі және температураның жоғарылауымен өзінің ең жоғары мәніне жетеді (70 %), одан әрі хром карбиді фазасы 40 % құраммен бастапқы күйіне қайта оралады. Құрамында хром бар басқа фазалар (Cr , Cr_2SiO_4) қалыпты әрекетке ие. 1473–1873 К температуралар аралығында аталған екі фаза да 11 % концентрациясы бар тұрақты күйде болады, әрі қарай температураның 1873 К-нен жоғарылауы хром фазасының күрт артуына (40 %) алып келеді және зерттелген температура аймағында өзгермейді. Хром силикатының фазасының құрамына келер болсақ, зерттелетін температуралар аймағында ол 11 % концентрациясымен тұрақты тепе-теңдік күйінде қалады.

Аталған негізгі құбылыстар хром карбидінің жоғары температураларда пайда болатынын және хром тотығы мен хром силикатының фазалары жоғары температураларда тұрақты екенін көруімізге болады.



Сурет 4 – Fe₃C, Fe, FeCr₂O₄ конденсацияланған фазалар құрамының температураға тәуелділігі



Сурет 5 – Fe₃C, FeS, Fe конденсацияланған фазалар құрамының температураға тәуелділігі

Fe₃C, Fe, FeCr₂O₄ құрамында темір бар конденсацияланған фазалар қызықты секірулер және өтулермен сипатталады (сурет 4). Темір хромитінің конденсацияланған фазасының құрамы 1473 К, 1873 К, 2173 К температураларда шамамен 35 % құрайды. Температураны 1473 К-ге көтеру аталған фазаның күрт төмендеуімен сипатталады және 1573–1773 К температуралық аралықта нөлге жақын құраммен тұрақты сипатқа ие

болады. Температураның жоғарылауы бізге күрт секірулерді анықтайды, максималды нүкте 35 %-дық құрам. 1973 К температура интервалында қисық тез нөлге ауысады, әрі қарай температураның жоғарылауы (2073–2273 К) қисықтың ұқсас көрінісін береді. 1473 К-нен жоғары температурада 38 % концентрациясы бар темір фазасы 5 %-ға дейін төмендейді (1573 К). Бұл фазаның күрт төмендеуі темір карбидінің басқа конденсацияланған фазаларға ыдырауы мен жаңа фазалардың түзілуімен түсіндіріледі. Темір карбидінің конденсацияланған фазасының (цементит) ең жоғары мәні 1473 К температурада 88 %-да болады, әрі қарай температураның 1673 К-ге дейін артуымен құрамы 12 %-ға дейін төмендейді және осы концентрациямен 1673–1773 К температура аралығында тұрақты күйде сақталады. Әрі қарай температураның жоғарылауымен алдыңғы қисықтардағыдай, шамамен 50 % құраммен секіргіш ауысулар байқалады.

5-ші суретте алдыңғы диаграммаға ұқсас сипаттауға болатын темір бар конденсацияланған фазалар анықталды. Бұл диаграмма жарқын, секіргіш сипатқа ие.

1473–1573 К температура шегіндегі темір карбидінің фазасы құрамы 75 %-дан 0 %-ға дейін күрт төмендейді, 1573–1773 К температура аралығында аталған фаза тұрақты күйге ие болады. 1773К-нен жоғары температурада шамамен 70 % максималды құрамға күрт ұмтылады, осы мөлшерге жеткенде қисық нөлге жуықтайды және 1973–2073 К температура аралығында осы күйде тұрақталады. Басқа температура диапазонында (2073–2273 К) ұқсас фазалық ауысуды байқаймыз. Темір сульфидінің фазасы темір карбидінің фазасына ұқсас, бірақ құрамы аз (40 %). 1473 К температурада 32 % болатын темірдің конденсацияланған фазасы мөлшері төмендейді және ыдырайды. Аталған термодинамикалық құбылыстар темір карбиді мен темір сульфидінің жоғары температуралы аймақтарда пайда болатындығы және реакцияға түсіп басқа формаға ауысуы мүмкіндігі анықталды.

Қорытынды

«Тегга» бағдарламасын қолдана отырып, жүйелердің фазалық құрамдары анықталды, фазалық ауысулардың пайда болуы және олардың ыдырауы егжей-тегжейлі қарастырылды, сонымен қатар қызықтыратын конденсацияланған фазалардың қалыптасуының температуралық мәндері анықталды. Бұл бағдарлама тепе-теңдік жағдайларын модельдеуге, есептеу әдісі мен алгоритмін жүзеге асыруға, сонымен қатар балқыту кезінде қорытпалардың бастапқы еру және балку температурасын анықтауға мүмкіндік береді.

Пайдаланған деректер тізімі

1 **Казенас, Е. К., Чижиков, Д. М.** Давление и состав пара над окислами химических элементов. – М., Наука. 1976. – С. 342.

2 **Акбердин, А. А.** Балансовый метод расчета равновесного фазового состава многокомпонентных систем [Текст] // КИМС. – 1995. – № 3. – С. 92–93.

3 **Акбердин, А. А., Сарекенов, К. З., Сайтов, Р. И.** Аналитическое описание фазового равновесия в системе $\text{CaO-SiO}_2\text{-FeO-ZnO}$ [Текст] // Вестник Карагандинского университета. – Караганда. – 2005. – № 1 (37). – С. 14–18.

4 **Банних, О. А., Будберг, П. Б., Алисова, С. П. и др.** Диаграммы состояния двойных и многокомпонентных систем на основе железа. Справочное издание. – М. : Металлургия, 1986. – 440 с.

5 **Белов, Г. В., Трусов, Б. Г.** Термодинамическое моделирование химически реагирующих систем. – Москва. МГТУ им. Н. Э. БАУМАНА. – 5 с.

6 **Белов, Г. В., Трусов, Б. Г.** Термодинамическое моделирование химически реагирующих систем. – Москва. МГТУ им. Н. Э. БАУМАНА. – 35 с.

7 **Симбинов, Р. Д., Малышев, В. П.** Термодинамическое, стехиометрическое и эксергетическое моделирование фазовых равновесий. – Алматы : Гылым, 1999. – 100 с.

8 **Синяров, Г. Б., Ватолин, Н. А., Трусов, Б. Г., Моисеев, Г. К.** Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов. М., 1982. – 260 с.

9 **Синяров, Г. Б., Ватолин, Н. А., Трусов, Б. Г., Моисеев, Г. К.** Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов. М., 1982. – 264 с.

10 **Искалиева, А. Т., Келаманов, Б. С., Ерсайынова, А. А.** Термодинамический расчет состояния фаз при выплавке феррохрома с помощью программного комплекса «TERRA». [Текст] // Материалы международной научно-практической конференции Байтурсьновские чтения – 2019. – Кустанай, 2019. – С. 382–385.

References

1 **Kazenas, Ye. K., Chizhikov, D. M.** Davleniye i sostav pary nad oksislitelyami khimicheskikh elementov. [Kazenas E. K., Chizhikov D. M. Pressure and composition of steam over oxides of chemical elements]. – М., Science. 1976. – P. 342.

2 **Akberdin, A. A.** Balansovyy metod rascheta ravnovesnogo fazovogo sostava mnogokomponentnykh sistem. [Akberdin A. A. Balance method for calculating the equilibrium phase composition of multicomponent systems [Text] // KIMS. – 1995. – No. 3. – P. 92–93.

3 **Akberdin, A. A., Sarekenov, K. Z., Saitov, R. I.** Analiticheskoye opisaniye fazovogo ravnesiya v sisteme $\text{CaO-SiO}_2\text{-FeO-ZnO}$ [Akberdin A. A., Sarekenov K. Z., Saitov R. I. Analytical description of phase equilibrium in the system $\text{CaO-SiO}_2\text{-FeO-ZnO}$ [Text] // Bulletin of Karaganda University. – Karaganda. – 2005. – No. 1 (37). – P. 14–18.

4 **Bannykh, O. A., Budberg, P. B., Alisova, S. P.** i dr. Diagrammy sostoyaniya dvoynykh i mnogokomponentnykh sistem na osnove zheleza. [Bannykh O. A., Budberg P. B., Alisova S. P. et al. Diagrams of the state of binary and multicomponent systems based on iron]. Reference edition. – M. : Metallurgy, 1986. – 440 p.

5 **Belov, G. V., Trusov B. G.** Termodinamicheskoye modelirovaniye khimicheskii reagiryushchikh sistem. [G. V. Belov, B. G. Trusov. Thermodynamic modeling of chemically reacting systems]. – Moscow. MSTU them. N. E. BAUMAN. – P. 5.

6 **Belov, G. V., Trusov B. G.** Termodinamicheskoye modelirovaniye khimicheskii reagiryushchikh sistem. [G. V. Belov, B. G. Trusov. Thermodynamic modeling of chemically reacting systems]. – Moscow. MSTU them. N. E. BAUMAN. – P. 35.

7 **Simbinov, R. D., Malyshev, V. P.** Termodinamicheskoye, stekhiometricheskoye i eksergeticheskoye modelirovaniye fazovykh ravnesiy [Simbinov R. D., Malyshev V. P. Thermodynamic, stoichiometric and exergy modeling of phase equilibria]. – Almaty : Gylym, 1999. – 100 p.

8 **Sinyarov, G. B., Vatolin, N. A., Trusov, B. G., Moiseev, G. K.** Primenenie EVM dlya termodinamicheskikh raschetov metallurgicheskikh protsessov [Sinyarov G. B., Vatolin N. A., Trusov B. G., Moiseev G. K. The use of computers for thermodynamic calculations of metallurgical processes]. M., 1982. – 260 p.

9 **Sinyarov, G. B., Vatolin, N. A., Trusov, B. G., Moiseev, G. K.** Primenenie EVM dlya termodinamicheskikh raschetov metallurgicheskikh protsessov [Sinyarov G. B., Vatolin N. A., Trusov B. G., Moiseev G. K. The use of computers for thermodynamic calculations of metallurgical processes]. M., 1982. – 264 p.

10 **Iskaliyeva, A. T., Kelamanov, B. S., Yersayynova, A. A.** Termodinamicheskii raschet sostoyaniya faz pri vyplavke ferrokhroma s pomoshch'yu programmnoho kompleksa «TERRA». [Iskaliyeva A. T., Kelamanov B. S., Yersayynova A. A. Thermodynamic calculation of the state of phases during smelting of ferrochrome using the TERRA software package. [Text] // Materials of the international scientific-practical conference Baytursynov reading – 2019. – Kostanay, 2019. – P. 382–385.

Б. С. Келаманов, А. М. Абдрашит, Г. М. Карменова, А. Ж. Идельбаев

Термодинамическое моделирование процесса выплавки сплавов на основе марганца и хрома

Актюбинский региональный университет К. Жубанова,
Республика Казахстан, г. Актобе.

Материал поступил в редакцию 11.12.20.

B. S. Kelamanov, A. M. Abdrashit, G. M. Karmenova, A. Zh. Idelbayev

Thermodynamic modeling of the process of smelting alloys based on manganese and chromium

K. Zhubanov Aktobe Regional University,
Republic of Kazakhstan, Aktobe.

Material received on 11.12.20.

В статье рассмотрены вопросы исследования термодинамических расчетов выплавки марганец и хромсодержащего ферросплава с использованием программного комплекса «Terra». В результате исследований термодинамических расчетов с использованием программного комплекса «Terra» были установлены основные существующие конденсированные фазы, характеризующие составы выплавляемых сплавов. Были исследованы характеристики разных существующих фаз и их динамика изменения при различных температурных интервалах.

Ключевые слова: термодинамические расчеты, термодинамическое моделирование, диаграмма, восстановление, конденсированные фазы.

The article deals with the study of thermodynamic calculations of manganese and chromium-containing ferroalloy smelting using the «Terra» software package. As a result of studies of thermodynamic calculations using the «Terra» software package, the main condensed phases characterizing the compositions of the smelted alloys were established. The characteristics of different existing phases and their dynamics of change at different temperature intervals were studied.

Keywords: thermodynamic calculations, thermodynamic modeling, diagram, recovery, condensed phases.

Теруге 11.12.2020 ж. жіберілді. Басуға 17.12.2020 ж. қол қойылды.

Электрондық баспа

3,99 Мб RAM

Шартты баспа табағы 26,6. Таралымы 300 дана. Бағасы келісім бойынша.

Компьютерде беттеген: А. К. Шукурбаева

Корректор: А. Р. Омарова

Тапсырыс № 3715

Сдано в набор 11.12.2020 г. Подписано в печать 17.12.2020 г.

Электронное издание

3,99 Мб RAM

Усл. печ. л. 26,6. Тираж 300 экз. Цена договорная.

Компьютерная верстка: А. К. Шукурбаева

Корректор: А. Р. Омарова

Заказ № 3715

«Toraighyrov University» баспасынан басылып шығарылған

«Торайғыров университет»

коммерциялық емес акционерлік қоғамы

140008, Павлодар қ., Ломов к., 64, 137 каб.

«Toraighyrov University» баспасы

«Торайғыров университет»

коммерциялық емес акционерлік қоғамы

140008, Павлодар қ., Ломов к., 64, 137 каб.

8 (7182) 67-36-69

e-mail: kereku@tou.edu.kz

www.vestnik.tou.edu.kz