

GTAMP 53.31.21

Al-C-Si ЖӘНЕ Al-C-Cr ЖҮЙЕЛЕРІНДЕГІ ТЕРМОДИНАМИКАЛЫҚ ҮРДІСТЕРДІ МОДЕЛЬДЕУ

А.Г. БУРУМБАЕВ ^[0000-0001-5276-2259], **Н.О. ҚҰЛЕКЕН** ^[0000-0002-1673-8435],
Б.С. КЕЛАМАНОВ ^[0000-0001-7649-9153], **Е. КӨБЕГЕН** ^[0000-0001-8790-7470],
С.К. КАБЫЛКАНОВ ^[0000-0002-1272-2065]

Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан Республикасы
e-mail: burumbayev.azamat@mail.ru

Андатпа. Мақалада Al-Cr-Si және Al-Cr-C үштік жүйелеріне арналған «Triangle» кешенді бағдарламасын қолдану арқылы термодинамикалық есептеулерді жүргізу және зерттеу сұрақтары қарастырылған. Алынған нәтижелер бойынша темір-титан қорытпаларында пайда болатын негізгі фазалар және олардың температураға байланысты өзгерістері зерттелді. Сонымен қатар, балқытудың нақты материалдық тепе-теңдігін жасау және қорытпаның құрамын термодинамикалық реттеу мүмкіндігі қарастырылды. Al-C-Si және Al-C-Cr жүйелерінде жоғары температуралы облыстарда өтетін металлургиялық үрдістерді болжау кезінде термодинамикалық модельдеуді пайдалану негізгі химиялық реакциялардың жүру механизмін орнатуға және реакциялардың нақты стехиометриялық арақатынасын анықтауға және жүйедегі фазалық тепе-теңдік шарттарын сақтау негізінде реакцияның дұрыс жазылуын көрсетуге мүмкіндік береді. Алынған нәтижелер темір-хром қорытпаларын балқытудың нақты материалдық балансын жасау негізін және қорытпаның құрамын реттейді. Хром негізіндегі төрткомпонентті Al-Cr-Si-C жүйесінің құрамдас бөліктері Al-C-Si және Al-C-Cr жүйелерінде жоғары температуралы облыстарда өтетін металлургиялық үрдістерді нақты сипаттайтын үшбұрыштарды зерттеу, қорытпа құрамын анықтауға жол ашады. Зерттелген температуралық интервалдарда пайда болатын фазалар, балқытылып алатын өнімнің нақты құраушылары болып табылады. Төрт компонентті жүйелерді зерттеу, модельдеу жұмыстары өндірістік мәселелерді шешуге басты алғышарт болады.

Түйін сөздер: термодинамика, фаза, жүйе, температура, диаграмма, қосылыстар.

Кіріспе. Көп компонентті жүйелерді кешенді теориялық зерттеу практикасында көп компонентті жүйелердегі фазалық айналымдардың ерекшеліктерін негізгі жүйе өлшемі бойынша термодинамикалық төзімді қарапайым ішкі жүйелерге бөлу арқылы зерттеуді әлдеқайда жеңілдететін термодинамикалық-диаграммалық талдау әдісі белгілі. Термодинамикалық-диаграммалық талдау зерттелетін жүйедегі компоненттердің химиялық өзара әрекеттесуінің термодинамикалық бағалауын геометриялық диаграммамен ұштастырады. Сондай-ақ, отқа төзімді материалдар және ферроқорытпалар өндірісінің физика-химиялық негіздерін зерттейді [1].

Қарапайым және нақты әдіс арқылы тотықтық жүйелердің фазалық құрамын есептеу

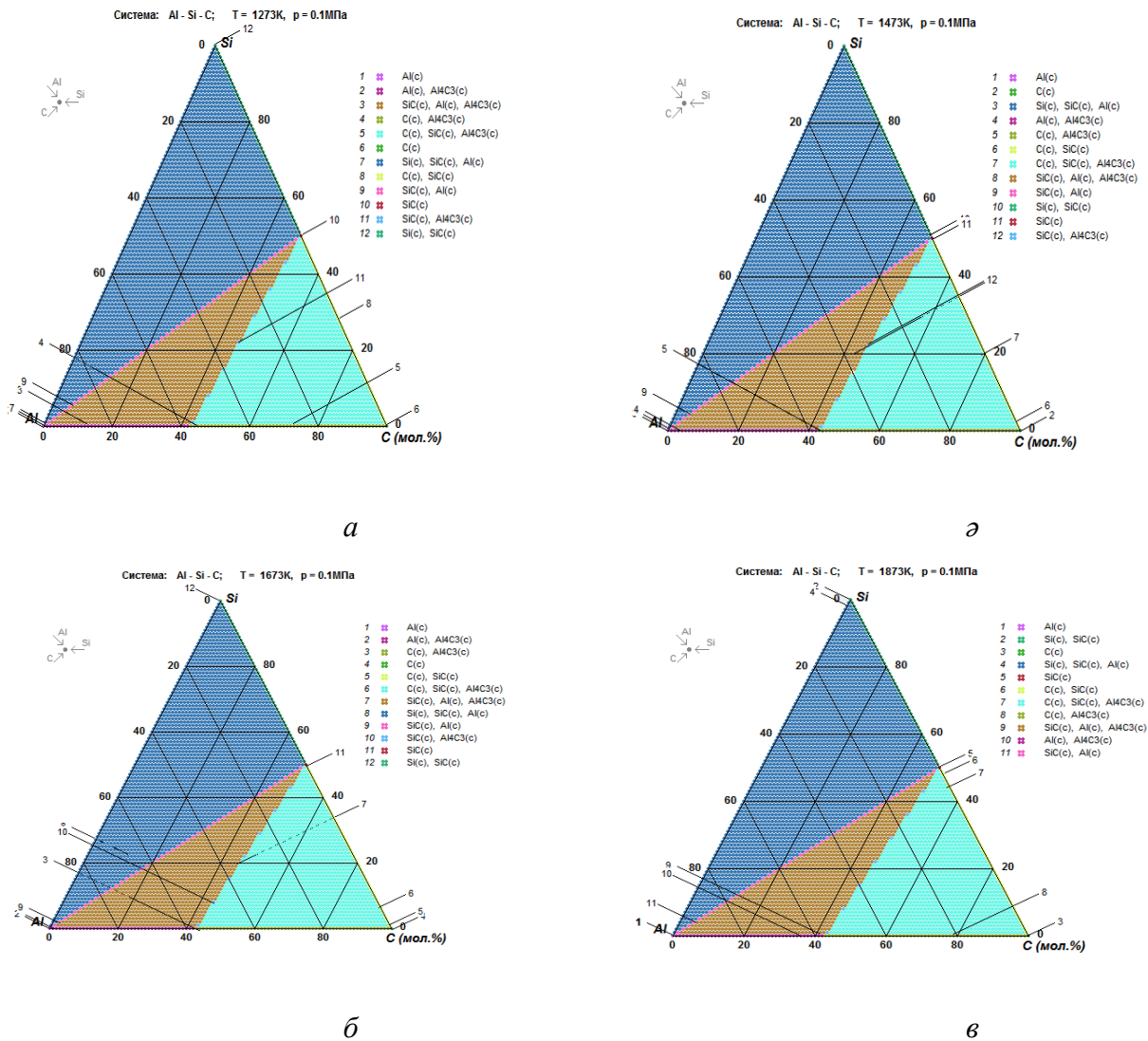
теңдігін профессор Акбердин А.А. ұсынды. Яғни, ол пайда болған фазалардың бастапқы тотықтарын бөлу теңгеріміне негізделеді [2,3]. Темір, оттегі және көміртегі негізіндегі жүйелердің толық термодинамикалық талдауын орындаған В.П. Малышев пен Р.Ж. Симбинов болып табылады [4]. Бұл үшбұрыштардағы жекелеген бөлімшелердің тепе-теңдік құрамы мен тиісті реакциялардың стехиометриялық стандартты жазбасының арасында туындайтын қайшылықтарды шешуге мүмкіндік береді. Мұндай есептеулердің көмегімен пайда болған фазалардың ақырғы фазалық облыстардан тұратын элементтердің бөлінуін анықтауға болады. Мұндай мәліметтерді екі жолмен: яғни тәжірибелік әдістер арқылы немесе термодинамикалық модельдеудің көмегімен қарастыруға болады. Соның біріншісі тәжірибелі әдіс өте көп еңбекті қажет етеді және оларды жүргізу мен интерпретациялау үшін үлкен уақыт шығындарын талап етеді (әсіресе көп компонентті жүйелер үшін). Ал термодинамикалық модельдеу әдістері тәжірибенің есептеу нәтижелерін анықтау кезінде тиімді болып табылады.

Сондықтан аталған жұмыс аясында «Тетра» кешенді бағдарламасының көмегімен Al-Cr-Si-C төрткомпонентті жүйені құрайтын, әрбір жеке жүйелерге термодинамикалық талдау жүргізілді. «Тетра» кешенді бағдарламасында «Triangle» интерфейсі қарастырылған, оның көмегімен бір циклде конденсацияланған барлық фазардың кешенін құруға болады.

Негізгі бөлім

Al-Cr-Si-C негізіндегі металдық жүйенің фазалық құрамын анықтау үшін графикалық әдіс қолданылды. Есептеу барысында көп компонентті жүйенің тетраэдрациясы тұрғызылды және осы тетраэдрде координат торларын қолдану арқылы құраушы фазалар анықталды.

«Triangle» кешенді бағдарламасы үш фазалы диаграммаларды құру үрдісін жеңілдетуге мүмкіндік береді. Сонымен қатар, тепе-теңдік фазалық құрамын есептеу үшін екі режимде жүргізуге болады. Яғни, біріншіден изотермиялық жағдай үшін, жүйенің тепе-теңдігі температурасы (T , К) және қысым (p , МПа) мәндерімен орнатылған кезде. Ал екіншіден есептеудің әр нүктесінде қысым (p , МПа) және энтальпия (бастапқы материалдардың қалыптасу энтальпиясы) (I , кДж/кг) мәндерімен көрсетілген адиабатикалық тепе-теңдік өзгерісі (жану) жағдайлары үшін.



Сурет 1 - Әртүрлі температурадағы Al-C-Si үштік жүйесінің фазалық құрамының диаграммасы: 1273К (а), 1473К (ә), 1673К (б), 1873К (в)

«Triangle» бағдарламасын қолдана отырып, Al-Cr-Si-C негізіндегі металдық жүйенің негізгі құраушылары болатын Al-Cr-C және Al-Si-C үштік жүйелерін зерттеу жұмысы жүргізілді. Аталған үштік жүйелер 1273, 1473, 1673 және 1873К температуралар интервалында термодинамикалық үрдістерге зерттеулер жасалды. Термодинамикалық өзгерістерге ұшырау мүмкіндіктері толық зерттеліп, жүйелердің диаграммалары тұрғызылды. Диаграмманы құру осы режимдегі температуралардың шамасына байланысты болып табылады. Нәтижелер 1-ші суретте көрсетілген.

«Triangle» кешенді бағдарламасын қолдана отырып 1273К температурада пайда болатын қосылыстардан тұратын үштік жүйенің фазалық диаграммасы тұрғызылды. Al-C-Si үштік жүйесі: 1)Al(c); 2)C(c) 3)Si(c), SiC(c); 4)Al(c), Al₄C₃(c); 5)C(c), Al₄C₃(c); 6)C(c), SiC(c); 7)C(c), SiC(c), Al₄C₃(c) 8)SiC(c), SiC(c), Al(c); 9)Al(c), SiC(c); 10)SiC(c), Al(c), Al₄C₃(c); 11)SiC(c), Al₄C₃(c) 11

фазадан тұрады (сурет 1(а)). Зерттелген температура кезінде жүйенің 50% $Si_{(c)}$, $Al_{(c)}$, $SiC_{(c)}$, 9% $Al_{(c)}$, $SiC_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, 30% $Al_{(c)}$, $C_{(c)}$, $SiC_{(c)}$, аз мөлшердегі қалған қосылыстар жиынтығы

1473К температурада пайда болатын қосылыстардан тұратын үштік жүйенің фазалық диаграммасының нәтижесінде Al-Si-C үштік жүйесі: 1) $Al_{(c)}$; 2) $Si_{(c)}$, $SiC_{(c)}$; 3) $C_{(c)}$; 4) $C_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 5) $C_{(c)}$, $SiC_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 6) $C_{(c)}$, $SiC_{(c)}$; 7) $SiC_{(c)}$; 8) $Si_{(c)}$, $SiC_{(c)}$, $Al_{(c)}$; 9) $Al_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 10) $SiC_{(c)}$, $Al_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 11) $SiC_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 12) $SiC_{(c)}$, $Al_{(c)}$; 12 құраушы фазалардан тұратындығы анықталды. 1473К температурада Al-Si-C үштік жүйесі 50% $Si_{(c)}$, $Al_{(c)}$, $SiC_{(c)}$, 30% $Al_{(c)}$, $SiC_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, аз мөлшердегі қалған қосылыстар жиынтығы Al-Si-C жүйесінің 20% мөлшерін құрады (сурет 1(ә)).

1673К температурада пайда болатын қосылыстардан тұратын үштік жүйенің фазалық диаграммасының нәтижесінде Al-Si-C үштік жүйесі: 1) $Al_{(c)}$; 2) $Si_{(c)}$, $SiC_{(c)}$; 3) $C_{(c)}$, $SiC_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 4) $C_{(c)}$; 5) $Si_{(c)}$, $SiC_{(c)}$, $Al_{(c)}$; 6) $SiC_{(c)}$, $Al_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 7) $Al_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 8) $SiC_{(c)}$, $Al_{(c)}$; 9) $C_{(c)}$, $SiC_{(c)}$; 10) $C_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; фазаларынан және аз мөлшердегі басқа да фазалардың 15% мөлшерінен құралады. Термодинамикалық жүйені талдау нәтижесінде температураны әрі қарай 1873К-ге жоғарлату келесі зерттеу нәтижелерін анықтады: Al-Si-C жүйесі 1873К температурада: : 1) $Al_{(c)}$; 2) $Si_{(c)}$, $SiC_{(c)}$; 3) $C_{(c)}$; 4) $C_{(c)}$, $SiC_{(c)}$; 5) $C_{(c)}$, $SiC_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 6) $SiC_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 7) $SiC_{(c)}$, $Al_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 8) $Si_{(c)}$, $SiC_{(c)}$, $Al_{(c)}$; 9) $SiC_{(c)}$; 10) $C_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 11) $Al_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 11 фазадан құралады. Жүйенің 50% $Si_{(c)}$, $Al_{(c)}$, $SiC_{(c)}$, 9% $Al_{(c)}$, $Si_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, 30% $Al_{(c)}$, $C_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, аз мөлшердегі қалған қосылыстар жиынтығы Al-Si-C жүйесінің 11% мөлшерін құрады (сурет 1(в)).

Кесте 1 - 1273К, 1473К, 1673К, 1873К температуралар интервалында Al-C-Si үштік жүйесінің фазалық құрамы

№	Фазалар	1273К	1473К	1673К	1873К
		Құрамы, %			
		N, моль/кг			
1	2	3	4	5	6
1	$Al_{(c)}$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$Al_{(c)}=37,0619$	$Al_{(c)}=37,0619$	$Al_{(c)}=37,0619$	$Al_{(c)}=37,0619$
2	$C_{(c)}$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$C_{(c)}=83,2560$	$C_{(c)}=83,2560$	$C_{(c)}=83,2560$	$C_{(c)}=83,2560$
3	$Si_{(c)}$ $SiC_{(c)}$	≤ 50	≤ 50	≤ 50	≤ 50
		$Si_{(c)}=35,6044$	$Si_{(c)}=35,6044$	$Si_{(c)}=35,6044$	$Si_{(c)}=35,6044$
		$SiC_{(c)}=0,0001$	$SiC_{(c)}=0,0001$	$SiC_{(c)}=0,0001$	$SiC_{(c)}=0,0001$
4	$Al_{(c)}$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	-

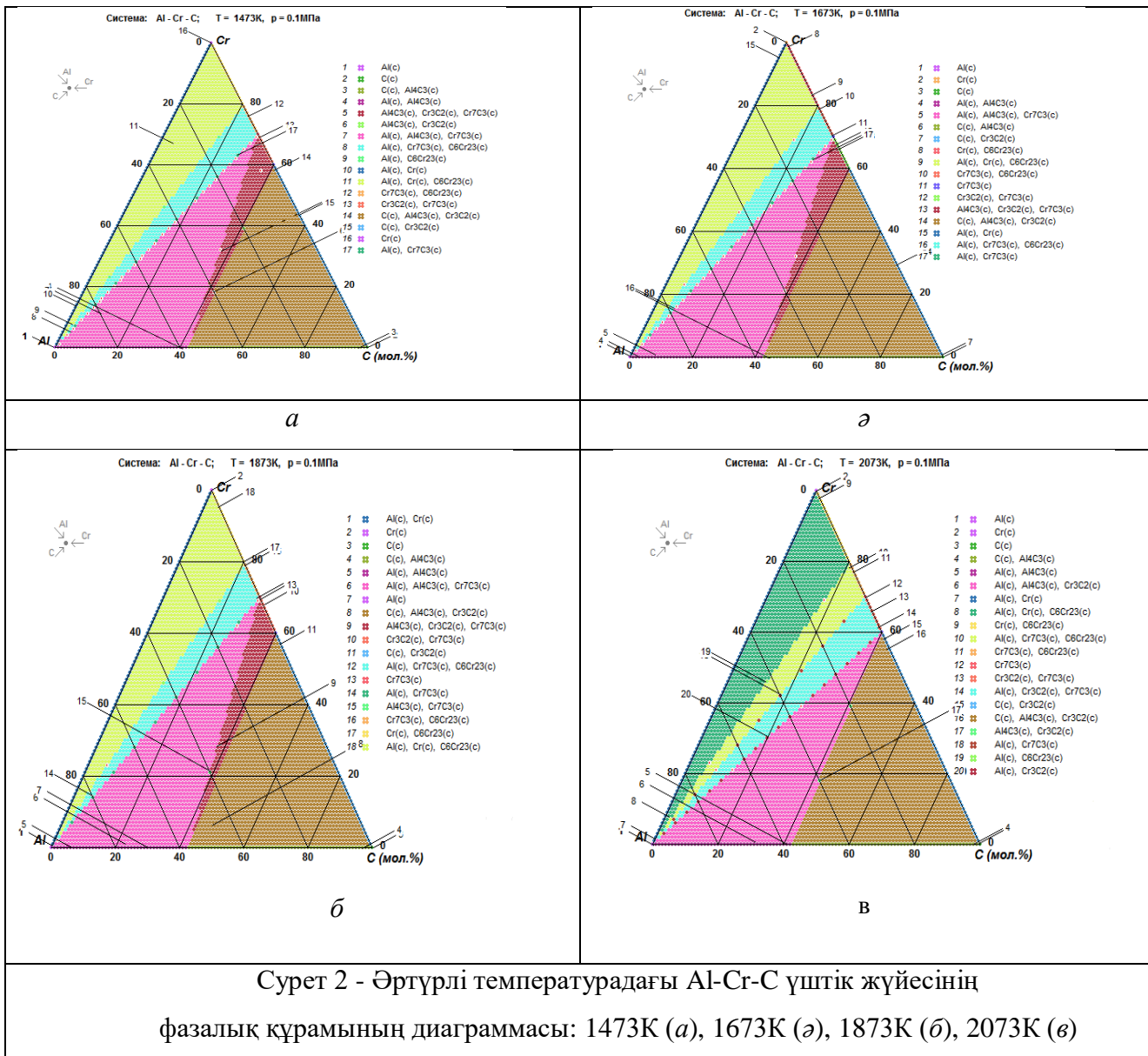
	$Al_4C_{3(c)}$	$Al(c)=36,3992$ $Al_4C_{3(c)}=0,1242$	$Al(c)=35,0511$ $Al_4C_{3(c)}=3,3769$	$Al(c)=33,6723$ $Al_4C_{3(c)}=0,6353$	$Al(c)=0,9665$ $Al_4C_{3(c)}=6,7652$
5	$C(c)$ $Al_4C_{3(c)}$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$C(c)=0,1217$ $Al_4C_{3(c)}=6,9362$	$C(c)=49,9776$ $Al_4C_{3(c)}=2,7765$	$C(c)=78,3880$ $Al_4C_{3(c)}=0,4062$	$C(c)=78,3880$ $Al_4C_{3(c)}=0,4062$
6	$C(c)$ $SiC_{(c)}$	≤ 30	≤ 30	≤ 30	≤ 30
		$C(c)=80,5134$ $SiC_{(c)}=0,8216$	$C(c)=75,2398$ $SiC_{(c)}=2,4013$	$C(c)=1,0056$ $SiC_{(c)}=24,6380$	$C(c)=67,8193$ $SiC_{(c)}=4,6241$
7	$C(c)$ $SiC_{(c)}$ $Al_4C_{3(c)}$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$C(c)=48,7463$ $SiC_{(c)}=9,7146$ $Al_4C_{3(c)}=0,1735$	$C(c)=29,9444$ $SiC_{(c)}=0,6111$ $Al_4C_{3(c)}=4,2778$	$C(c)=9,0819$ $SiC_{(c)}=20,3008$ $Al_4C_{3(c)}=0,5342$	$C(c)=57,7449$ $SiC_{(c)}=4,3719$ $Al_4C_{3(c)}=0,9108$
8	$Si_{(c)}$ $SiC_{(c)}$ $Al(c)$	≤ 9	≤ 10	≤ 9	≤ 10
		$Si_{(c)}=17,5113$ $SiC_{(c)}=12,3861$ $Al(c)=0,4271$	$Si_{(c)}=1,4735$ $SiC_{(c)}=23,5766$ $Al(c)=2,4912$	$Si_{(c)}=3,3695$ $SiC_{(c)}=10,1086$ $Al(c)=18,5323$	$Si_{(c)}=0,8069$ $SiC_{(c)}=6,4554$ $Al(c)=26,6287$
9	$SiC_{(c)}$ $Al(c)$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$SiC_{(c)}=0,3725$ $Al(c)=36,5084$	$SiC_{(c)}=24,2726$ $Al(c)=0,9907$	$SiC_{(c)}=3,0921$ $Al(c)=32,4669$	-
10	$SiC_{(c)}$ $Al(c)$ $Al_4C_{3(c)}$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$SiC_{(c)}=0,7934$ $Al(c)=28,8275$ $Al_4C_{3(c)}=1,3224$	$SiC_{(c)}=0,4761$ $Al(c)=3,3326$ $Al_4C_{3(c)}=6,1891$	$SiC_{(c)}=12,2176$ $Al(c)=7,2053$ $Al_4C_{3(c)}=2,1929$	$SiC_{(c)}=16,7314$ $Al(c)=0,8202$ $Al_4C_{3(c)}=2,1324$
11	$SiC_{(c)}$ $Al_4C_{3(c)}$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$SiC_{(c)}=10,8170$ $Al_4C_{3(c)}=3,9335$	$SiC_{(c)}=3,9057$ $Al_4C_{3(c)}=5,8585$	-	$SiC_{(c)}=17,8275$ $Al_4C_{3(c)}=1,9808$
12	$SiC_{(c)}$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		-	$SiC_{(c)}=24,9393$	-	$SiC_{(c)}=24,9393$

Келесі термодинамкалық зеттеулер Al-Cr-C үштік металдық жүйесіне жүргізілді.

1473К температурада зерттелетін үштік жүйенің фазалық диаграммасы келесідей нәтижелер көрсетті: жүйені 17 фаза құрайды оларға 1) $Al_{(c)}$; 2) $Cr_{(c)}$; 3) $C_{(c)}$; 4) $Al_{(c)}$, $Cr_{(c)}$; 5) $Al_{(c)}$, $Cr_{(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$; 6) $Al_{(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$; 7) $Al_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$; 8) $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$; 9) $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$; 10) $C_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$; 11) $C_{(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$; 12) $C_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 13) $Al_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$; 14) $Cr_3C_{2(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$; 15) $Cr_7C_{3(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$; 16) $Cr_{(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$; 17) $Al_{(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$; фазалары кіреді. Аталған жүйе құрамын 1473К температурада 50% $Al_{(c)}$, $Cr_{(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$, 31% $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$ 5% $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$; және қалған қосылыстар жүйенің 14%-ын құрайды (сурет 2(а)).

Зерттелетін температура 1673К-ге тең болған жағдайда үштік жүйенің фазалық диаграммасының (сурет 2(ә)) нәтижесі 19 қосылысты көрсетті 1) $Al_{(c)}$; 2) $Cr_{(c)}$; 3) $C_{(c)}$; 4) $Al_{(c)}$,

Cr(c); 5)Al(c), Cr(c), C₆Cr₂₃(c); 6) Al(c), Cr₇C₃(c), C₆Cr₂₃(c); 7)Al(c), Cr₇C₃(c); 8) Al(c), Al₄C₃(c), Cr₇C₃(c); 9) Al(c), Al₄C₃(c); 10) Al₄C₃(c), Cr₃C₂(c), Cr₇C₃(c); 11) C(c), Al₄C₃(c), Cr₃C₂(c); 12) Al₄C₃(c), Cr₃C₂(c); 13) C(c), Al₄C₃(c); 14) Cr₇C₃(c); 15) Cr₃C₂(c); 16) C(c), Cr₃C₂(c); 17) Cr(c), C₆Cr₂₃(c); 18) Cr₇C₃(c), C₆Cr₂₃(c); 19) Cr₃C₂(c), Cr₇C₃(c); 1673К температурада Al-Cr-C үштік жүйесін 50% x-Al(c), x-Cr(c), C(c), 13% Cr₇C₃(c), x- Al₄C₃(c), Al(c), 13% Cr₃C₂(c), x- C₆Cr₂₃(c), Al₄C₃(c), 8% Al₄C₃(c), C₆Cr₂₃(c) x-Al(c), 6% Cr₃C₂(c), Cr₇C₃(c); x- C₆Cr₂₃(c) және қалған қосылыстар жүйенің 10%-ын құрайтындығы анықталды. Зерттелетін температура жоғарылаған сайын (1873К) үштік жүйенің фазалық диаграммасыда өзгерістерге ұшырайды(сурет 2(б)).



Зерттеу нәтижесінде Al-Cr-C үштік жүйесін құраушы фазалар саны 20 екендігі анықталды: 1)Al(c); 2)Cr(c); 3)C(c); 4)Al(c), Cr(c); 5)Al(c), Cr(c), C₆Cr₂₃(c); 6) Al(c), Cr₇C₃(c), C₆Cr₂₃(c); 7)Al(c), Cr₇C₃(c); 8) Al(c), Al₄C₃(c), Cr₇C₃(c); 9) Al(c), Al₄C₃(c); 10) Al₄C₃(c), Cr₃C₂(c), Cr₇C₃(c); 11) Al₄C₃(c),

$Cr_3C_{2(c)}$; 12) $C_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$; 13) $C_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 14) $C_{(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$; 15) $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$; 16) $Cr_{(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$; 17) $Cr_7C_{3(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$; 18) $Cr_7C_{3(c)}$; 19) $Cr_3C_{2(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$; 20) $Cr_3C_{2(c)}$; Зерттелген жүйе 50% $x-Al_{(c)}$, $x-Cr_{(c)}$, $C_{(c)}$, 13% $Cr_7C_{3(c)}$, $x-Al_4C_{3(c)}$, $Al_{(c)}$, 13% $Cr_3C_{2(c)}$, $x-C_6Cr_{23(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, 8% $Al_4C_{3(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$ $x-Al_{(c)}$, фазаларынан және аз мөлшердегі басқа да фазалардың 16% мөлшерінен құралады.

$Al-Cr-C$ жүйесін 2073K температура кезінде жүргізілген зерттеу жұмыстары бойынша 20 қосылыстан тұратыны анықталды: 1) $Al_{(c)}$; 2) $Cr_{(c)}$; 3) $C_{(c)}$;4) $Al_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 5) $Al_{(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$; 6) $Al_{(c)}$, $Cr_{(c)}$; 7) $Al_{(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$; 8) $Al_{(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$; 9) $C_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$; 10) $Al_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$; 11) $Al_{(c)}$, $Cr_{(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$; 12) $Cr_{(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$; 13) $Cr_7C_{3(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$; 14) $Cr_3C_{2(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$; 15) $Cr_3C_{2(c)}$; 16) $C_{(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$; 17) $C_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$; 18) $Al_{(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$, 19) $Al_{(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$, 20) $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$. Жүйе 50% $Al_{(c)}$, $Cr_{(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$ 5% $Al_4C_{3(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$; аз мөлшердегі басқа да фазалардың 14% мөлшерінен құралады(сурет 2(в)).

Кесте 2 - 1473K, 1673K, 1873K, 2073K температуралар кезінде $Al-Cr-C$ үштік жүйесінің фазалық құрамы

№	Фазалар	1473K	1673K	1873K	2073K
		Құрамы, %			
		N, моль/кг			
1	2	3	4	5	6
1	$Al_{(c)}$;	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$Al_{(c)}=37,0618$	$Al_{(c)}=37,0618$	$Al_{(c)}=37,0618$	$Al_{(c)}=37,0618$
2	$Cr_{(c)}$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$Cr_{(c)}=19,2317$	$Cr_{(c)}=19,2317$	$Cr_{(c)}=19,2317$	$Cr_{(c)}=19,2317$
3	$C_{(c)}$	≤ 50	≤ 50	≤ 50	≤ 50
		$C_{(c)}=83,2560$	$C_{(c)}=83,2560$	$C_{(c)}=83,2560$	$C_{(c)}=83,2560$
4	$Al_{(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$;	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$Al_{(c)}=37,0619$ $Al_4C_{3(c)}=0,3669$	$Al_{(c)}=37,0619$ $Al_4C_{3(c)}=1,7707$	$Al_{(c)}=37,0619$ $Al_4C_{3(c)}=0,7274$	$Al_{(c)}=37,0619$ $Al_4C_{3(c)}=0,3769$
5	$Al_{(c)}$, $Cr_7C_{3(c)}$, $C_6Cr_{23(c)}$;	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$Al_{(c)}=9,7109$ $Cr_{(c)}=12,2195$ $C_6Cr_{23(c)}=0,0809$	$Al_{(c)}=31,5608$ $Cr_{(c)}=1,4451$ $C_6Cr_{23(c)}=0,0578$	$Al_{(c)}=25,6533$ $Cr_{(c)}=3,3136$ $C_6Cr_{23(c)}=0,1069$	$Al_{(c)}=6,5831$ $Cr_{(c)}=0,3798$ $C_6Cr_{23(c)}=0,6330$
6	$Al_{(c)}$, $Cr_{(c)}$;	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$Al_{(c)}=10,6433$	$Al_{(c)}=26,1281$	$Al_{(c)}=26,6796$	$Al_{(c)}=34,8046$

		$Cr_7C_{3(c)}=0,4043$ $C_6Cr_{23(c)}=0,4346$	$Cr_7C_{3(c)}=0,2327$ $C_6Cr_{23(c)}=0,1592$	$Cr_7C_{3(c)}=0,3088$ $C_6Cr_{23(c)}=0,1235$	$Cr_7C_{3(c)}=0,0671$ $C_6Cr_{23(c)}=0,0269$
7	$Al(c),$ $C_6Cr_{23(c)};$	≤ 9	≤ 13	≤ 10	≤ 9
		$Al(c)=11,0763$ $Al_4C_{3(c)}=0,1385$ $Cr_7C_{3(c)}=1,7030$	$Al(c)=27,0402$ $Cr_7C_{3(c)}=0,6760$	$Al(c)=27,0402$ $Cr_7C_{3(c)}=0,6760$	$Al(c)=32,3671$ $Cr(c)=2,4359$
8	$Al(c),$ $Cr_3C_{2(c)},$ $Cr_7C_{3(c)};$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$Al_4C_{3(c)}=3,7884$ $Cr_7C_{3(c)}=1,1365$	$Al(c)=27,1374$ $Al_4C_{3(c)}=6,3512$ $Cr_7C_{3(c)}=0,6331$	$Al(c)=27,1374$ $Al_4C_{3(c)}=0,2139$ $Cr_7C_{3(c)}=0,5924$	$Al(c)=22,9917$ $C_6Cr_{23(c)}=0,2626$
9	$C(c),$ $Al_4C_{3(c)},$ $Cr_3C_{2(c)};$	≤ 9	-	-	≤ 9
		$Al_4C_{3(c)}=3,8467$ $Cr_3C_{2(c)}=0,7693$ $Cr_7C_{3(c)}=0,7693$	$Al_4C_{3(c)}=4,4007$ $Cr_3C_{2(c)}=0,0800$ $Cr_7C_{3(c)}=0,8801$	$Al_4C_{3(c)}=4,1183$ $Cr_3C_{2(c)}=0,4314$ $Cr_7C_{3(c)}=0,8237$	$Al_4C_{3(c)}=14,2892$ $Cr_3C_{2(c)}=0,2382$ $Cr_7C_{3(c)}=1,4289$
10	$Al(c),$ $Al_4C_{3(c)},$ $Cr_3C_{2(c)};$	≤ 1	-	≤ 1	≤ 1
		$C(c)=0,6450$ $Al_4C_{3(c)}=4,1757$ $Cr_3C_{2(c)}=2,1727$	$C(c)=0,6721$ $Al_4C_{3(c)}=4,0328$ $Cr_3C_{2(c)}=2,2852$	$C(c)=1,3663$ $Al_4C_{3(c)}=4,0989$ $Cr_3C_{2(c)}=2,1861$	$C(c)=6,8623$ $Al_4C_{3(c)}=1,4705$ $Cr_3C_{2(c)}=3,9213$
11	$Al(c),$ $Cr(c),$ $C_6Cr_{23(c)};$	≤ 1	-	-	≤ 1
		$C(c)=11,9025$ $Cr_3C_{2(c)}=4,7610$	$C(c)=2,9759$ $Cr_3C_{2(c)}=5,3566$	$C(c)=31,8501$ $Cr_3C_{2(c)}=3,4300$	$C(c)=80,7921$ $Cr_3C_{2(c)}=0,2056$
12	$Cr(c),$ $C_6Cr_{23(c)};$	≤ 5	-	-	≤ 5
		$C(c)=78,3881$ $Al_4C_{3(c)}=0,4062$	$C(c)=16,6672$ $Al_4C_{3(c)}=5,5557$	$C(c)=43,3181$ $Al_4C_{3(c)}=3,3322$	$C(c)=2,9759$ $Cr_3C_{2(c)}=5,3566$
13	$Cr_7C_{3(c)},$ $C_6Cr_{23(c)};$	≤ 8	≤ 8	≤ 10	≤ 8
		$Al(c)=11,0977$ $Al_4C_{3(c)}=4,6895$ $Cr_7C_{3(c)}=0,0637$	$Cr_7C_{3(c)}=2,4999$	$Cr_7C_{3(c)}=2,4999$	$Al(c)=0,9833$ $Al_4C_{3(c)}=0,4916$ $Cr_3C_{2(c)}=5,0146$
14	$Cr_3C_{2(c)},$ $Cr_7C_{3(c)};$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$Cr_3C_{2(c)}=4,9447$ $Cr_7C_{3(c)}=0,2747$	$Cr_3C_{2(c)}=5,5551$	$Cr_3C_{2(c)}=5,5551$	$Cr_3C_{2(c)}=5,5551$
15	$Cr_3C_{2(c)};$	≤ 1	-	≤ 1	≤ 1
		$Cr_7C_{3(c)}=1,6451$ $C_6Cr_{23(c)}=0,2697$	$Cr_7C_{3(c)}=0,3258$ $C_6Cr_{23(c)}=0,6859$	$Cr_7C_{3(c)}=0,3258$ $C_6Cr_{23(c)}=0,6859$	$Cr_7C_{3(c)}=0,5798$ $C_6Cr_{23(c)}=0,6057$
16	$C(c),$ $Cr_3C_{2(c)};$	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
		$Cr(c)=2,9018$ $C_6Cr_{23(c)}=0,6697$	$Cr(c)=15,1675$ $C_6Cr_{23(c)}=1,1667$	$Cr(c)=17,6443$ $C_6Cr_{23(c)}=0,0651$	$Cr(c)=12,5689$ $C_6Cr_{23(c)}=0,2732$
17	$C(c),$ $Al_4C_{3(c)};$	≤ 1	-	-	≤ 1
		$Al(c)=11,4965$ $Cr_7C_{3(c)}=1,7245$	$Cr_3C_{2(c)}=3,1913$ $Cr_7C_{3(c)}=1,0638$	$Cr_3C_{2(c)}=1,0203$ $Cr_7C_{3(c)}=2,0408$	$Cr_3C_{2(c)}=1,0204$ $Cr_7C_{3(c)}=2,0408$
18	$Al(c),$	≤ 5	-	-	≤ 5

	$Cr_7C_{3(c)}$,		$Al(c)=23,0624$ $Al_4C_{3(c)}=2,6239$	$Al(c)=3,1756$ $Al_4C_{3(c)}=6,3512$	$Al(c)=1,4064$ $Cr_3C_{2(c)}=5,3444$
19	$Al(c)$, $Cr_3C_{2(c)}$,	≤ 1	-	-	≤ 1
			$Al_4C_{3(c)}=3,9688$ $Cr_3C_{2(c)}=2,3813$	$Al_4C_{3(c)}=3,9688$ $Cr_3C_{2(c)}=2,3813$	$Al_4C_{3(c)}=1,6340$ $Cr_3C_{2(c)}=4,2484$
20	$Al_4C_{3(c)}$, $Cr_3C_{2(c)}$.	≤ 1	≤ 1	≤ 1	≤ 1
				$Cr_3C_{2(c)}=51,136$ 5	$Al(c)=11,4965$ $Cr_3C_{2(c)}=1,7245$

Қорытынды. Алынған нәтижелерді талдау барысында зерттелген Al-Cr-Si-C металдық жүйесінің негізгі құраушылары болатын Al-Cr-Si және Al-Cr-C үштік жүйелерінің фазалар құрамы мен саны бойынша ауқымды өзгерістерге ұшырайтындығы анықталды. 1273-1873К температуралар арасында Al-C-Si жүйесін зерттеу жұмыстарының нәтижесі бойынша жүйенің құрамын орташа 12 фаза құрайтындығы дәлелденді. Негізінен жүйенің басым бөлігін шамамен 50% $Si(c)$, $Al(c)$, $SiC(c)$, фазалары құрайды. Al-Cr-C үштік жүйесінің зерттеу нәтижелерінде ауқымды өзгерістер орын алатындығы дәлелденді. Төмен температуралық интервалда 1473К зерттеу жұмыстары кезінде зерттелген жүйені құраушы фазалар саны 17-ға тең болатындығына көз жеткізілді. Температуралық шкала 1673К-ге температураға артқан жағдайда Fe-Ti-Si жүйесін құраушы фазалар саны 18-ге тартуы байқалды. 1873К кезінде жүйе 20 фазадан тұрады. Басқа температуралық интервалдарда кездеспейтін 1) $Al(c)$, $Cr(c)$, $Cr_7C_{3(c)}$, $Al_4C_{3(c)}$, фазалары осы температура кезінде пайда болатыны анықталды. Зерттеу нәтижелері темір-хром қорытпаларын балқытудың нақты материалдық тепе-теңдігін құру негізін және қорытпаның құрамын реттеу мүмкіндігін береді.

Әдебиеттер тізімі

1. Габдуллин Т.Г., Такенов Т.Д., Байсанов С.О., Букетов Е.А. Физико-химические свойства марганцевых шлаков. - Алматы: Наука, 1984. - 232с.
2. Акбердин А.А. Балансовый метод расчета равновесного фазового состава многокомпонентных систем //КИМС. - 1995. - №3. - С. 92-93.
3. Акбердин А.А., Сарекенов К.З., Сайтов Р.И. Аналитическое описание фазового равновесия в системе $CaO-SiO_2-FeO-ZnO$ //Вестник Карагандинского университета. - Караганда. - 2005. - №1(37). - С. 14-18.
4. Симбинов Р.Д., Малышев В.П. Термодинамическое, стехиометрическое и эксергетическое моделирование фазовых равновесий. - Алматы: Гылым, 1999. - 100с.

References

1. Gabdullin T.G., Takenov T.D., Bajsanov S.O., Buketov E.A. Fiziko-himicheskie svojstva margancevyh shlakov. - Almaty: Nauka, 1984. - 232s.. [in Russian].
2. Akberdin A.A. Balansovyj metod rascheta ravnovesnogo fazovogo sostava mnogokomponentnyh sistem //KIMS. - 1995. - №3. - S. 92-93. [in Russian].
3. Akberdin A.A., Sarekenov K.Z., Saitov R.I. Analiticheskoe opisanie fazovogo ravnovesiya v sisteme CaO-SiO₂-FeO-ZnO //Vestnik Karagandinskogo universiteta. - Karaganda. - 2005. - №1(37). - S. 14-18.. [in Russian].
4. Simbinov R.D., Malyshev V.P. Termodinamicheskoe, stekhiometricheskoe i eksergeticheskoe modelirovanie fazovyh ravnovesij. - Almaty: Gylym, 1999. - 100s. [in Russian].

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В СИСТЕМАХ Al-C-Si И Al-C-Cr

**А.Г. БУРУМБАЕВ, Н.О. ҚҰЛЕКЕН, Б.С. КЕЛАМАНОВ, Е. КӨБЕГЕН,
С.К. КАБЫЛКАНОВ**

Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, Ақтөбе, Қазақстан
e-mail: burumbayev.azamat@mail.ru

Аннотация. В статье рассмотрены вопросы проведения и исследования термодинамических расчетов с использованием комплексной программы «triangle» для тройных систем Al-Cr-Si и Al-Cr-C. По полученным результатам были изучены основные фазы, возникающие в сплавах железо-титан и их изменения в зависимости от температуры. Кроме того, была рассмотрена возможность создания реального материального баланса плавления и термодинамического регулирования состава сплава. Использование термодинамического моделирования при прогнозировании металлургических процессов, протекающих в высокотемпературных областях в системах Al-C-Si и Al-C-Cr позволяет установить механизм протекания основных химических реакций и определить точное стехиометрическое соотношение реакций и показать правильную запись реакции на основе соблюдения условий фазового равновесия в системе. Полученные результаты регулируют основу составления фактического материального баланса плавления железо-хромовых сплавов и состав сплава. Компоненты четырехкомпонентной системы Al-Cr-Si-C на основе хрома позволяют исследовать треугольники, четко характеризующие металлургические процессы, протекающие в высокотемпературных областях в системах Al-C-Si и Al-C-Cr, определять состав сплава. Фазы, возникающие в исследуемых температурных интервалах, являются фактическими составляющими выплавляемого продукта. Исследование, моделирование четырехкомпонентных систем станет главной предпосылкой для решения производственных задач.

Ключевые слова: термодинамика, фаза, система, температура, диаграмма, соединения.

MODELING OF THERMODYNAMIC PROCESSES IN Al-C-Si AND Al-C-Cr SYSTEMS

A. BURUMBAYEV, N. KULEKEN, B. KELAMANOV, Ye. KOBEGEN, S. KABYLKANOV

K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan

e-mail: burumbayev.azamat@mail.ru

Abstract. The article discusses the issues of conducting and researching thermodynamic calculations using the complex program "Triangle" for triple systems Al-Cr-Si and Al-Cr-C. Based on the results obtained, the main phases arising in iron-titanium alloys and their changes depending on temperature were studied. In addition, the possibility of creating a real material balance of melting and thermodynamic regulation of the alloy composition was considered. The use of thermodynamic modeling in predicting metallurgical processes occurring in high-temperature regions in the Al-C-Si and Al-C-Cr systems makes it possible to establish the mechanism of the main chemical reactions and determine the exact stoichiometric ratio of reactions and show the correct recording of the reaction based on compliance with the conditions of phase equilibrium in the system. The results obtained regulate the basis for compiling the actual material balance of the melting of iron-chromium alloys and the composition of the alloy. The components of the four-component chromium-based Al-Cr-Si-C system make it possible to study triangles that clearly characterize the metallurgical processes occurring in high-temperature regions in the Al-C-Si and Al-C-Cr systems, to determine the composition of the alloy. The phases occurring in the studied temperature ranges are the actual components of the smelted product. Research and modeling of four-component systems will be the main prerequisite for solving production problems.

Key words: thermodynamics, phase, system, temperature, diagram, compounds.