

CR-FE-AL-SI ЖҮЙЕСІН ТЕРМОДИНАМИКАЛЫ-ДИАГРАММАЛЫҚ ТАЛДАУ

ШАБАНОВ Е.Ж.^{*ID}, ХИСМАТУЛИН Д.О.^{ID}, ЖУМАГАЛИЕВ Е.У.^{ID},
ДЖУНДИБАЕВА А.С.^{ID}

***Шабанов Ербол Жақсылықұлы** – PhD, қауымдастырылған профессор, Metallurgia және тау-кен ісі кафедрасының профессоры, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ., Қазақстан

E-mail: yshabanov@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-6902-1211>

Хисматулин Даниил Олегович – Магистрант, Қ.Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ., Қазақстан

E-mail: daniil.h@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0007-9698-3476>

Жумағалиев Ерлан Уланович – Техника ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Metallurgia және тау-кен ісі кафедрасының профессоры, Қ.Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ., Қазақстан

E-mail: yzhumagaliyev@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2227-0661>

Джундибаева Ақгүл Сұлтанбекқызы – 1 курс докторант, Торайғыров университеті, Павлодар қ., Қазақстан.

E-mail: ajundibaeva@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0009-0006-5244-3497>

Андатпа: Бұл жұмыста Cr-Fe-Al-Si металлдық жүйесінің фазалық диаграммасын құру мәселесі термодинамикалы-диаграммалық талдау (ТДТ) әдістерін пайдалану арқылы қарастырылады. FactSage және HSC Chemistry бағдарламалық кешендері көмегімен орындалған термодинамикалық есептеулер негізінде жүйедегі барлық қосылыстардың стандартты Гиббс энергиясы (ΔG^0_{1723}), энтальпиясы (ΔH^0_{1723}) және энтропиясы (ΔS^0_{1723}) анықталды. Cr-Fe-Al, Cr-Fe-Si, Cr-Al-Si және Fe-Al-Si төрт тройлық қосалқы жүйелерінің триангуляциясы жүргізілді, конгруэнтті және инконгруэнтті балқығыш қосылыстар ескеріліп, фазалардың тұрақтылық облыстары анықталды. Жүргізілген тетраэдрация нәтижесінде жүйе 24 элементарлық тетраэдрден тұратыны және олардың салыстырмалы көлемдерінің қосындысы 0,9978-ге тең екендігі анықталды, бұл есептеулердің дұрыстығын растайды. Құрамында Al-15%, Si-40%, Cr-25%, Fe-20% бар қорытпа үшін фазалық құрамды модельдеу және қоспалар ережесі бойынша балку температурасын жуық есептеу жүргізілді, алынған мән шамамен 1450 °C құрады. Құрылған фазалық диаграмма және алынған трансформация теңдеулері қорытпа құрамының өзгеруіне байланысты фазалардың эволюциясын болжауға, алюмосиликохром балқытуға арналған оңтайлы шихтаны таңдауға және тотықсыздандыру процестерінің технологиялық тиімділігін арттыруға мүмкіндік береді. Алынған нәтижелер хром негізіндегі жаңа қорытпаларды әзірлеу және металлургиялық процестерді оңтайландыру кезінде шығындарды азайту және дайын өнім сапасын арттыру мақсатында пайдаланылуы мүмкін.

Түйін сөздер: Cr-Fe-Al-Si жүйесі, фазалық диаграмма, термодинамикалы-диаграммалық талдау, Гиббс энергиясы, тетраэдрация, алюмосиликохром, термодинамикалық модельдеу.

Кіріспе.

Бұл жұмыста Cr-Fe-Al-Si жүйесі үшін фазалық құрылым диаграммасын құру мүмкіндігі қарастырылады, ол хром негізіндегі қорытпалардың құрамын модельдеумен және термодинамикалық-диаграммалық талдау әдістерін қолданумен байланысты.

Al-15%, Si-40%, Cr-25%, Fe-20% құрамды кешенді қорытпаның балку температурасын есептеу үшін эмпирикалық әдістерді немесе қоспалар ережесі немесе CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams) сияқты модельдерді пайдалануға болады, егер фазалық әрекеттесулер туралы толық ақпарат қолжетімді болса. Алайда, үштен артық компоненті бар күрделі жүйелер үшін балку температурасын болжау тәжірибелік деректерсіз аса күрделі болып табылады.

Қорытпаның балку температурасы (T_m) шамамен оның компоненттерінің балку температураларының молярлық үлестерін ескере отырып, орташа мәні ретінде есептелуі мүмкін. Бұл әдіс қоспалар ережесі деп аталады [1]. Дегенмен, ол эвтектикалық реакцияларды және компоненттердің өзара әрекеттесуін ескермейді, бұл балку температурасын едәуір төмендетуі мүмкін.

Компоненттердің балку температуралары:

- Al: 660,3 °C
- Si: 1414 °C
- Cr: 1907 °C
- Fe: 1538 °C

Молярлық үлестерді есептеу кезеңдері:

1. Элементтердің молярлық массалары:

- Al: 26.98 г/моль
- Si: 28.09 г/моль
- Cr: 52.00 г/моль
- Fe: 55.85 г/моль

2. Компоненттердің молярлық үлестерін есептейміз:

- Al: 1526.98
- Si: 4028.09
- Cr: 2552.00
- Fe: 2055.85

3. Жиынтық молярлық үлесті табамыз:

$$Al=1526.98 \approx 0.555$$

$$Si=4028.09 \approx 1.424$$

$$Cr=2552.00 \approx 0.481$$

$$Fe=2055.85 \approx 0.358$$

$$\text{Молярлық үлестердің қосындысы} = 0.555 + 1.424 + 0.481 + 0.358 \approx 2.818$$

4. Салмақтық үлестерді табамыз:

$$wAl = 0.555 \cdot 2.818 \approx 0.197$$

$$wSi = 1.424 \cdot 2.818 \approx 0.505$$

$$wCr = 0.481 \cdot 2.818 \approx 0.171$$

$$wFe = 0.358 \cdot 2.818 \approx 0.127$$

5. Орташа балку температурасын есептейміз:

$$Tm \approx 0.197 \times 660.3 + 0.505 \times 1414 + 0.171 \times 1907 + 0.127 \times 1538$$

$$Tm \approx 130.12 + 714.07 + 326.10 + 195.43$$

$$Tm \approx 1450^\circ\text{C} \approx 1723\text{K}$$

Зерттеу материалдары мен әдістері.

Бұл металлдық жүйеге стандартты жағдайда тетраэдрация жүргізу үшін оның бастапқы компоненттері арасындағы барлық қосылыстардың Гиббс энергиясының (ΔG_{1723}) мәндерін анықтау қажет. ΔG_{1723} бойынша анықтамалық мәліметтер FactSage және HSC Chemistry бағдарламалық кешендерінен алынды.

Кез келген қосылыстың стандартты Гиббс энергиясының мәнін кез келген температурада, ΔH_T^0 және ΔS_T^0 мәндері белгілі кезінде, Гиббс–Гельмгольцтің белгілі теңдеуін пайдалана отырып анықтауға болады (мұндағы Т индексі температураға тәуелділікті көрсетеді) [2]:

$$\Delta G_T^0 = \Delta H_T^0 - T \Delta S_T^0 \quad (1)$$

Жүйенің көптеген қосылыстары үшін тек қана ΔS^0 мәндері емес, сонымен қатар олардың жылу сыйымдылығы туралы деректер де қатты және сұйық күйінде жоқ болғандықтан, жұмыста Cr-Fe-Al-Si жүйесінің фазалық құрылысының диаграммасын 1723 Кельвин температурасында

құру міндеті қойылды.

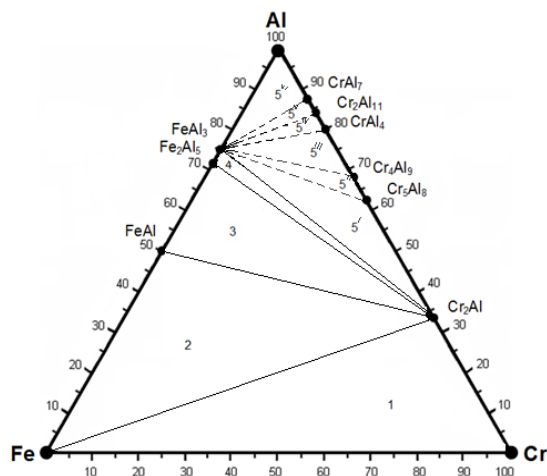
Анықтамалықтарда деректері жоқ ΔG_{1723}^0 қосылыстар үшін **FactSage** және **HSC Chemistry** бағдарламалық кешендерінің есептеу нәтижелері пайдаланылды.

Нәтижелер және оларды талқылау.

Кесте 1. Термодинамикалық параметрлерді есептеу нәтижелері

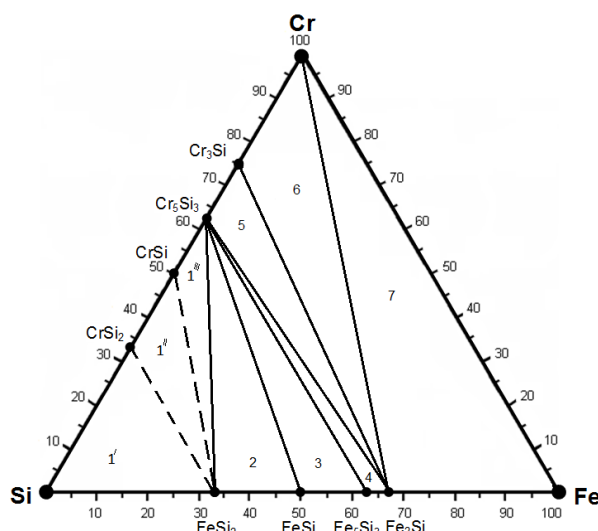
Қосылыстар	ΔG_{1723}	ΔS_{1723}	ΔH_{1723}
	кДж/моль	Дж/моль	
Fe ₂ Al ₅	-873,031	854,115	17592,8
FeSi	-241,351	147,338	9829,3
Fe ₂ Si	-366,749	256,892	75875,4
Cr ₂ Al	-325,954	247,791	100989,2
Cr ₃ Si	-408,875	289,541	57670,0
Cr ₃ Si ₃	-987,297	568,380	8337,5
CrSi ₂	-317,873	199,948	40519,5
FeAl	-247,943	180,743	11476,5
FeAl ₃	-495,364	289,076	103285,9
Fe ₃ Si ₃	-974,618	648,269	145547,8
FeSi ₂	-295,234	208,425	42838,9
CrAl ₇	-836,066	642,015	270125,5
Cr ₂ Al ₁₁	-1383,410	1041,632	411322,0
CrAl ₄	-540,820	396,410	142192,8
Cr ₄ Al ₉	-1414,874	1079,437	444994,9
Cr ₅ Al ₈	-1404,241	1078,748	435428,6
CrSi	-216,225	136,446	19346,1
Al	-102,677	90,900	53906,1
Si	-71,902	92,133	87229,2
Cr	-84,819	76,617	47155,6
Fe	-100,192	90,106	55051,3

Одан әрі осы және анықтамалық деректерге негізделе отырып Cr-Fe-Al-Si жүйесіндегі ΔG_{1723}^0 қосылыстар туралы, бастапқыда оның төрт бүйірлік үштік қосалқы жүйесінің: Cr-Fe-Al, Cr-Fe-Si, Cr-Al-Si және Fe-Al-Si барлығына триангуляция жүргізілді. Триангуляция әдістемесі [3] еңбегінде жеткілікті толық сипатталған.



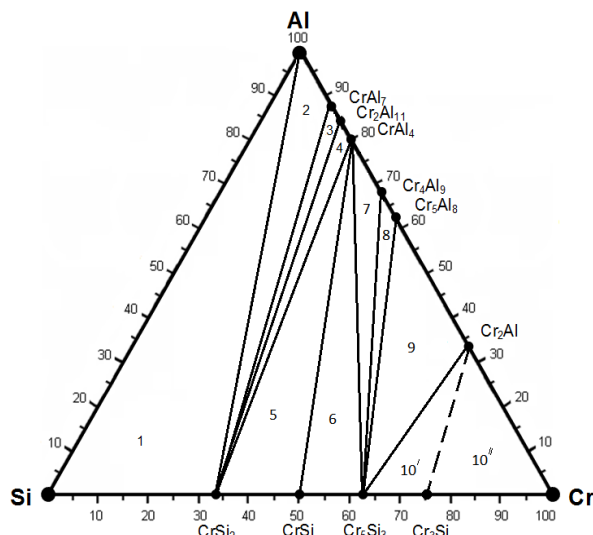
Сурет 1. – Cr-Fe-Al жүйесі

Триангуляцияны (конгруэнтті және инконгруэнтті қосылыстарды ескере отырып) Fe - Al - Cr (сур. 1) үштік жүйесінде жүргізу барысында бес аймақ қалыптасты. Fe - Cr - Cr_2Al (1), Fe - Cr_2Al - FeAl (2), FeAl - Cr_2Al - Fe_2Al_5 (3) және Fe_2Al_5 - FeAl₃ - Cr_2Al (4) аймақтарында инконгруэнтті қосылыстар жоқ. Сонымен қатар, FeAl₃ - Al - Cr_2Al аймағында бір инконгруэнтті қосылыс – FeAl₃ бар, сәйкесінше бұл инконгруэнтті қосылыс аталған аймақты алты кіші аймаққа бөледі: FeAl₃ - Cr_2Al - Cr_5Al_8 (5^I), FeAl₃ - Cr_5Al_8 - Cr_4Al_9 (5^{II}), FeAl₃ - Cr_4Al_9 - CrAl_4 (5^{III}), FeAl₃ - CrAl_4 - $\text{Cr}_2\text{Al}_{11}$ (5^{IV}), FeAl₃ - $\text{Cr}_2\text{Al}_{11}$ - CrAl_7 (5^V) и FeAl₃ - Al - CrAl_7 (5^{VI}).



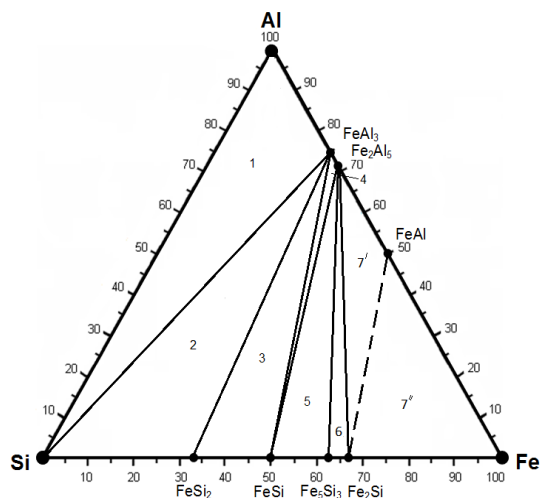
Сурет 2. –Cr-Fe-Si жүйесі

Si-Cr-Fe (сурет 2) үштік жүйесінде триангуляция жүргізу барысында жеті аймақ қалыптасты. Сонымен қатар, Si - Cr_5Si_3 - FeSi_2 аймағында бір конгруэнтті қосылыс – CrSi_2 бар, оның нәтижесінде үш кіші аймақ пайда болды: Si- CrSi_2 - FeSi_2 (1^I), CrSi - FeSi_2 - CrSi_2 (1^{II}) және CrSi - FeSi_2 - Cr_5Si_3 (1^{III}). FeSi - Cr_5Si_3 - FeSi_2 (2), Cr_5Si_3 - Fe_5Si_3 - FeSi (3), Fe_2Si - Cr_5Si_3 - Fe_5Si_3 (4), Fe_2Si - Cr_5Si_3 - Cr_3Si (5), Cr - Cr_3Si - Fe_2Si (6) және Fe_2Si - Cr - Fe (7) аймақтарында инконгруэнтті қосылыстар жоқ.



Сурет 3. –Cr-Al-Si жүйесі

Si – Al – Cr (сурет 3) үштік жүйесінің триангуляциясын жүргізу барысында он аймақ қалыптасты. Аймақтарда: Si - Al - CrSi₂ (1), CrSi₂ - Al - CrAl₇ (2), CrSi₂ - CrAl₇ - Cr₂Al₁₁ (3), CrSi₂ - Cr₂Al₁₁ - CrAl₄ (4), CrSi₂ - CrAl₄ - CrSi (5), CrSi - CrAl₄ - Cr₅Si₃ (6), Cr₅Si₃ - CrAl₄ - Cr₄Al₉ (7), Cr₅Si₃ - Cr₅Al₈ - Cr₄Al₉ (8), Cr₅Si₃ - Cr₅Al₈ - Cr₂Al (9) инконгруэнтті қосылыстар жоқ. Диаграмманың Cr₅Si₃ – Cr₂Al – Cr бөлігінде бір конгруэнтті қосылыс – Cr₂Al бар, соның нәтижесінде екі кіші аймақ түзіледі: Cr₅Si₃ - Cr₂Al - Cr₃Si (10^I) және Cr₃Si - Cr₂Al - Cr (10^{II}).



Сурет 4. –Fe-Al-Si жүйесі

Si - Al - Fe (сурет 4) үштік жүйесінің триангуляциясын (конгруэнтті және инконгруэнтті қосылыстарды ескере отырып) жүргізу барысында жеті аймақ қалыптасты. Si - Al - FeAl₃ (1), Si - FeSi₂ - FeAl₃ (2), FeAl₃ - FeSi₂ - FeSi (3), FeAl₃ - FeSi - Fe₂Al₅ (4), FeSi - Fe₂Al₅ - Fe₅Si₃ (5) және Fe₂Al₅ - Fe₅Si₃ - Fe₂Si (6) аймақтарында инконгруэнтті қосылыстар жоқ. Ал Fe₂Al₅ - Fe₂Si - Fe аймағында бір инконгруэнтті қосылыс – FeAl бар, осыған байланысты аталған инконгруэнтті қосылыс бұл аймақты екі кіші аймаққа бөледі: Fe₂Si - Fe₂Al₅ - FeAl (7^I) и FeAl - Fe - Fe₂Si (7^{II}).

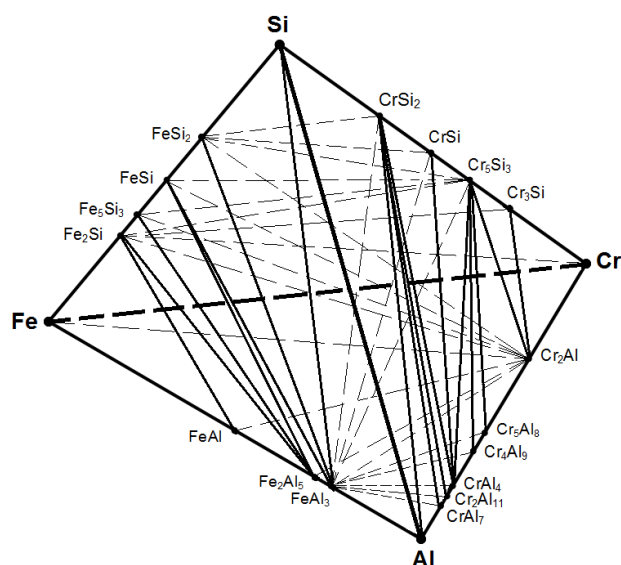
Кесте 2. Cr-Fe-Al-Si жүйесіндегі конгруэнтті және инконгруэнтті металл қосылыстары және олардың төрттік концентрациялық симплекстегі координаталары

№	Қосылыстар	Массалық құрам негізіндегі координаттар			
		Cr	Fe	Al	Si
1	Cr	1000	0	0	0
2	Fe	0	1000	0	0
3	Al	0	0	1000	0
4	Si	0	0	0	1000
5	FeAl	0	675	325	0
6	Fe ₂ Al ₅	0	453	547	0
7	FeAl ₃	0	409	591	0
8	Fe ₂ Si	0	800	0	200
9	Fe ₅ Si ₃	0	769	0	231
10	FeSi	0	667	0	333
11	FeSi ₂	0	500	0	500
12	CrAl ₇	216	0	784	0
13	Cr ₂ Al ₁₁	259	0	741	0

14	CrAl ₄	325	0	675	0
15	Cr ₄ Al ₉	461	0	539	0
16	Cr ₅ Al ₈	546	0	454	0
17	Cr ₂ Al	790	0	210	0
18	Cr ₃ Si	848	0	0	152
19	Cr ₅ Si ₃	755	0	0	245
20	CrSi	650	0	0	350
21	CrSi ₂	481	0	0	519

Қабылданған координаттар (массалық үлес *1000 негізінде) Cr-Fe-Al-Si жүйесінің конгруэнтті қосылыстарына қатысты және олардың кристалдану аймақтарын зерттеу барысында пайдаланылатын мәліметтер 2-кестеде келтірілген. Жүйеде 24 қарапайым және күрделі қосылыс түзіледі [4].

5-суретте метастабильді қосылыстарды ескермей талданған жүйенің жалпы көрінісі көрсетілген.



Сурет 5. – Cr-Fe-Al-Si металдық жүйесінің тетраэдрациясы

Жалпы жүйенің бөлінуі конгруэнтті және инконгруэнтті балқитын қосылыстарды ескере отырып жүзеге асырылды. Элементарлық тетраэдрлердің салыстырмалы көлемдерінің қосындысы бірлікке (0,9978) жуық, бұл жүргізілген тетраэдрацияның дұрыстығын дәлелдейді [5].

Кесте 3. Cr-Fe-Al-Si жүйесінің тетраэдрлер тізімі

№	Тетраэдр	Көлем
1	Si – Al – FeAl ₃ – CrSi ₂	0,1967
2	FeAl ₃ – FeSi ₂ – FeSi – Cr ₂ Al	0,0779
3	FeSi – Fe ₅ Si ₃ – Fe ₂ Al ₅ – Cr ₂ Al	0,0440
4	Fe ₂ Al ₅ – Fe ₅ Si ₃ – Fe ₂ Si – Cr ₂ Al	0,0133
5	Cr – Fe ₂ Si – Cr ₃ Si – Cr ₂ Al	0,0255
6	Cr ₃ Si – Fe ₂ Si – Cr ₅ Si ₃ – Cr ₂ Al	0,0156
7	Cr ₅ Si ₃ – Fe ₂ Si – Fe ₅ Si ₃ – Cr ₂ Al	0,0168
8	Cr ₅ Si ₃ – Fe ₅ Si ₃ – FeSi – Cr ₂ Al	0,0161

9	$\text{Cr}_5\text{Si}_3 - \text{FeSi} - \text{FeSi}_2 - \text{Cr}_2\text{Al}$	0,0264
10	$\text{Cr}_5\text{Si}_3 - \text{FeSi}_2 - \text{CrSi} - \text{FeAl}_3$	0,0310
11	$\text{CrSi} - \text{FeSi}_2 - \text{CrSi}_2 - \text{FeAl}_3$	0,0499
12	$\text{Fe} - \text{Cr} - \text{Cr}_2\text{Al} - \text{Fe}_2\text{Si}$	0,0420
13	$\text{CrSi}_2 - \text{FeSi}_2 - \text{Si} - \text{FeAl}_3$	0,1421
14	$\text{Fe} - \text{Cr}_2\text{Al} - \text{FeAl} - \text{Fe}_2\text{Si}$	0,0513
15	$\text{FeAl} - \text{Cr}_2\text{Al} - \text{Fe}_2\text{Al}_5 - \text{Fe}_2\text{Si}$	0,0350
16	$\text{Fe}_2\text{Al}_5 - \text{Cr}_2\text{Al} - \text{FeAl}_3 - \text{FeSi}$	0,0115
17	$\text{FeAl}_3 - \text{Cr}_2\text{Al} - \text{Cr}_5\text{Al}_8 - \text{Cr}_5\text{Si}_3$	0,0244
18	$\text{FeAl}_3 - \text{Cr}_5\text{Al}_8 - \text{Cr}_4\text{Al}_9 - \text{Cr}_5\text{Si}_3$	0,0085
19	$\text{FeAl}_3 - \text{Cr}_4\text{Al}_9 - \text{CrAl}_4 - \text{Cr}_5\text{Si}_3$	0,0255
20	$\text{FeAl}_3 - \text{CrAl}_4 - \text{Cr}_2\text{Al}_{11} - \text{CrSi}_2$	0,0140
21	$\text{FeAl}_3 - \text{Cr}_2\text{Al}_{11} - \text{CrAl}_7 - \text{CrSi}_2$	0,0091
22	$\text{FeAl}_3 - \text{CrAl}_7 - \text{Al} - \text{CrSi}_2$	0,0458
23	$\text{CrAl}_4 - \text{CrSi}_2 - \text{CrSi} - \text{FeAl}_3$	0,0466
24	$\text{CrAl}_4 - \text{Cr}_5\text{Si}_3 - \text{CrSi} - \text{FeAl}_3$	0,0289
Қорытынды		0,9978

Қорытынды. Осылайша, келтірілген мәліметтер мен жүргізілген есептеулер нәтижелері Cr-Fe-Al-Si металдық жүйесінің фазалық құрылым диаграммасының тетраэдрациясының дұрыстығын растайды. Бұл кейіннен көміртекті жыныстарынан алюминий мен кремнийді тотықсыздандырып, метал балқытқандағы өнімдердің фазалық құрамын анықтауға мүмкіндік береді.

Әдебиеттер тізімі

1. Глушко В.П. Термодинамические константы веществ. – М.: Академия Наук СССР. Выпуск VII. Часть 1, 1974. 343 с.
2. Морачевский А.С., Сладков И.В. Термодинамические расчеты в металлургии // Справочник М.:Металлургия. 1985.137 с.
3. Касенов Б.К., Алдабергенов М.К., Пашинкин А.С., Касенова Ш.Б., Балакеева Г.Т., Адекенов С.М. Химия мен металлургиядағы қолданбалы термодинамика әдістері. – Қарағанды: «Гласир», 2008. – 332 б.
4. Габдуллин Т.Г., Такенов Т.Д., Байсанов С.О., Букетов Е.А. Mn шлактарының физика-химиялық қасиеттері. – Алматы: Ғылым, 1984.
5. Heath D.L. // Mathematical Treatment of Multicomponent Systems // Jour. Amer. Ceram. Soc. - 1957. - Vol. 40, №2. - P. 50-53.

References

1. Glushko V.P. Termodinamicheskie konstanty veshchestv. – M.: Akademiya Nauk SSSR. Vypusk VII. CHast' 1, 1974. 343 s.
2. Morachevskij A.S., Sladkov I.V. Termodinamicheskie raschety v metallurgii // Spravochnik M.:Metallurgiya. 1985.137 s.
3. Kasenov B.K., Aldabergenov M.K., Pasinkin A.S., Kasenova S.B., Balakeeva G.T., Adekenov S.M. Himia men metalurgiaday qoldanbaly termodinamika adisteri. - Qaragandy: «Glasir», 2008. - 332 b.
4. Gabdullin T.G., Takenov T.D., Baisanov S.O., Buketov E.A. Mn şlaktarynyñ fizika-himialyq qasietteri. – Almaty: Ğylym, 1984.
5. Heath D.L. // Mathematical Treatment of Multicomponent Systems // Jour. Amer. Ceram. Soc. - 1957. - Vol. 40, №2. - P. 50-53.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ-ДИАГРАММНЫЙ АНАЛИЗ СИСТЕМЫ CR-FE-AL-SI

ШАБАНОВ Е.Ж.*^{ID}, ХИСМАТУЛИН Д.О.^{ID}, ЖУМАГАЛИЕВ Е.У.^{ID},
ДЖУНДИБАЕВА А.С.^{ID}

*Шабанов Ербол Жақсылықұлы – PhD, ассоциированный профессор, профессор кафедры Metallургии и горного дела, Актюбинский региональный университет имени К.Жубанова, г. Актөбе, Казахстан.

E-mail: yshabanov@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-6902-1211>

Хисматулин Даниил Олегович – Магистрант, Актюбинский региональный университет имени К.Жубанова, г. Актөбе, Казахстан.

E-mail: daniil.h@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0007-9698-3476>

Жумағалиев Ерлан Уланович – Кандидат технических наук, ассоциированный профессор, профессор кафедры Metallургии и горного дела, Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, г. Актөбе, Казахстан.

E-mail: yzhumagaliyev@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2227-0661>

Джундибаева Ақгүл Султанбековна – PhD докторант 1 курса, Торайғыров университет, г. Павлодар, Казахстан.

E-mail: ajundibaeva@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0009-0006-5244-3497>

Аннотация. В работе рассматривается построение диаграммы фазового строения металлической системы Cr-Fe-Al-Si с использованием методов термодинамически-диаграммного анализа (ТДА). На основе данных термодинамических расчетов, выполненных с использованием программных комплексов FactSage и HSC Chemistry, определены стандартные значения энергии Гиббса (ΔG_{1723}), энтальпии (ΔH_{1723}) и энтропии (ΔS_{1723}) всех соединений системы. Проведена триангуляция четырех тройных подсистем Cr-Fe-Al, Cr-Fe-Si, Cr-Al-Si и Fe-Al-Si с учетом конгруэнтно и инконгруэнтно плавящихся соединений, что позволило выделить области устойчивости фаз. В результате выполненной тетраэдрации установлено, что система состоит из 24 элементарных тетраэдров, сумма относительных объемов которых равна 0,9978, что подтверждает корректность проведенных расчетов. Для сплава с содержанием Al-15%, Si-40%, Cr-25%, Fe-20% выполнено моделирование фазового состава и приближенный расчет температуры плавления по правилу смесей, полученное значение составило около 1450 °C. Построенная фазовая диаграмма и полученные уравнения трансформации позволяют прогнозировать эволюцию фаз при изменении состава сплавов, выбирать оптимальную шихту для выплавки алюмино-силикохрома и повышать технологическую эффективность процессов восстановления. Полученные результаты могут быть использованы при разработке новых сплавов на основе хрома и оптимизации металлургических процессов с целью снижения затрат и повышения качества конечной продукции.

Ключевые слова: Cr-Fe-Al-Si система, фазовая диаграмма, термодинамически-диаграммный анализ, энергия Гиббса, тетраэдрация, алюмино-силикохром, термодинамическое моделирование

THERMODYNAMIC-DIAGRAM ANALYSIS OF THE CR-FE-AL-SI SYSTEM

SHABANOV YE.ZH.*^{ID}, KHISMATULIN D.O.^{ID}, ZHUMAGALIEV YE.U.^{ID},
DZHUNDIBAEVA A.S.^{ID}

Shabanov Yerbol Zhaksylykuly* – PhD, associate professor, professor of the department of metallurgy and mining, Aktobe Regional University named after K. Zhubanov, Aktobe, Kazakhstan.

E-mail: yshabanov@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-6902-1211>

Khismatulin Daniil Olegovich – Master's student, Aktobe Regional University named after K. Zhubanov, Aktobe, Kazakhstan.

E-mail: daniil.h@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0007-9698-3476>

Zhumagaliyev Yerlan Ulanovich - Candidate of technical sciences, associate professor, professor department of metallurgy and mining, Aktobe Regional University named after K. Zhubanov, Aktobe, Kazakhstan.

E-mail: yzhumagaliyev@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2227-0661>

Dzhundibaeva Akgul Sultanbekovna – 1st year PhD doctoral student, Toraihyrov University, Pavlodar, Kazakhstan.

E-mail: ajundibaeva@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0009-0006-5244-3497>

Abstract. This work examines the construction of the phase diagram of the Cr-Fe-Al-Si metallic system using thermodynamic-diagram analysis (TDA) methods. Based on thermodynamic calculations performed with the FactSage and

HSC Chemistry software packages, standard Gibbs energy (ΔG_{1723}), enthalpy (ΔH_{1723}), and entropy (ΔS_{1723}) values for all compounds of the system were determined. Triangulation of the four ternary subsystems Cr-Fe-Al, Cr-Fe-Si, Cr-Al-Si, and Fe-Al-Si was carried out, considering congruently and incongruently melting compounds, which made it possible to identify the phase stability regions. As a result of tetrahedration, it was established that the system consists of 24 elementary tetrahedrons, and the total relative volume equals 0.9978, which confirms the correctness of the calculations. For the alloy containing Al-15%, Si-40%, Cr-25%, and Fe-20%, phase composition modeling and approximate melting temperature calculation using the rule of mixtures were performed, resulting in a value of about 1450 °C. The constructed phase diagram and the obtained transformation equations make it possible to predict the evolution of phases as the alloy composition changes, select the optimal charge mixture for aluminumsilicochromium smelting, and improve the technological efficiency of reduction processes. The obtained results can be applied in the development of new chromium-based alloys and the optimization of metallurgical processes to reduce costs and improve the quality of the final product.

Key words: Cr-Fe-Al-Si system, phase diagram, thermodynamic-diagram analysis, Gibbs energy, tetrahedration, aluminumsilicochromium, thermodynamic modeling