

УДК 669.53:168.3

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ И ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СИСТЕМЕ ОКИСЛЕННАЯ МАРГАНЦЕВАЯ РУДА – УГЛЕРОД

Колесников А.С.¹, к.т.н., доцент кафедры технологии цемента, керамики
и стекла (kas164@yandex.ru)

Сергеева И.В.², д.биол.н., профессор, зав. кафедрой «Ботаника, химия и экология»

Ботабаев Н.Е.¹, д.т.н., профессор, декан Высшей школы текстильной и пищевой инженерии

Альжанова А.Ж.¹, к.т.н., доцент, зав. кафедрой «Технологии цемента, керамики и стекла»

Аширбаев Х.А.¹, к.т.н., доцент, зав. кафедрой «Математика для технических специальностей»

¹ Южно-Казахстанский государственный университет им. М. Ауэзова
(160012, Казахстан, Шымкент, проспект Тауке хана, 5)

² Саратовский государственный аграрный университет им. Н.И. Вавилова
(410012, Россия, Саратов, Театральная пл., 1)

Аннотация. Проведено термодинамическое моделирование химических и фазовых превращений в системе окисленная марганцевая руда – углерод. Термодинамическое прогнозирование моделирования химических и фазовых превращений в системе проводилось с помощью многоцелевого программного комплекса, предназначенного для моделирования равновесных состояний и процессов в высокотемпературных системах с химическими и фазовыми превращениями «Астра 4», разработанного в МГТУ им. Баумана. Расчеты состава фаз и характеристик равновесия проводились с использованием справочной базы данных по свойствам индивидуальных веществ. Основу информации в базе данных программного комплекса «Астра 4» составляют термодинамические, теплофизические и термохимические свойства индивидуальных веществ, которые были систематизированы в Институте высоких температур АН СССР, в национальном бюро стандартов США, опубликованные в периодической печати, монографиях, справочниках, а также обработанные и рассчитанные в МГТУ им. Н.Э. Баумана. Изучение моделирования химических и фазовых превращений в системе проводилось в температурном интервале 1573 – 2573 К с содержанием углерода в системе 5 – 10 – 15 % и давлении 0,1 МПа. В ходе моделирования было установлено, что максимальная степень перехода марганца в KMn_2Si_3 до 95,3 при $T = 1873$ К и 30 %-ном содержании восстановителя в системе. При дальнейшем увеличении температуры марганец начинает переходить в газовую фазу. Кремний, в сравнении с марганцем, восстанавливается более трудно, и с увеличением температуры начинает переходить в газовую фазу. Наиболее оптимальный температурный интервал восстановления кремния 1773 – 1873 К с содержанием восстановителя в системе от 15 до 30 %. Степень перехода железа (α_{Fe} , %) в условиях системы в зависимости от температуры и содержания восстановителя позволила определить оптимальный температурный интервал 1773 – 1873 К при содержании восстановителя 15 %. Проведенное термодинамическое моделирование фазовых переходов системы марганцевая руда – восстановитель позволило проанализировать возможность получения ферросиликомарганца из труднообогащаемых окисленных марганцевых руд месторождения Западный Камыс путем их электроплавки.

Ключевые слова: термодинамический анализ, химические и фазовые превращения, моделирование, марганец, кремний, железо, окисленная марганцевая руда, газовая и конденсированная фазы, металлы, электроплавка, ферросплав.

DOI: 10.17073/0368-0797-2017-9-769-765

По запасам марганцевых руд Республика Казахстан занимает третье место в мире. В Республике Казахстан (РК) имеется более 100 месторождений марганцевых руд, однако учтены и числятся на балансе всего 23 месторождения. В РК до 60 % запасов с содержанием марганца 10 – 20 %, до 30 % содержат 20 – 30 % Mn и 11 % имеют содержание марганца больше 30 %. При этом все типы марганцевых руд имеют низкий показатель содержания фосфора (до 0,08 %) и серы (до 0,3 %) [1 – 3]. Марганецсодержащие руды в Казахстане представлены железомарганцевыми, оксидными (окисленными) и труднообогащаемыми рудами. В настоящее время осуществляется добыча и переработка в основном окисленных марганцевых руд, которые находятся преимущественно в верхних частях месторождений,

при этом они не требуют никаких материальных затрат для разработки и обогащения [2, 4, 5]. Такими окисленными труднообогащаемыми рудами обладает месторождение Камыс с запасами марганцевых руд до 10 млн т., представленное месторождениями Западный и Восточный Камыс. Месторождение Западный Камыс находится в Жанааркинском районе, утвержденные запасы 5,0 млн т. Малая глубина залегания руд месторождения (до 250 м) и их комплексность способствуют эффективному использованию для добычи. Руды месторождения в своем составе содержат до 30 % кремнезема [1, 2, 5, 6].

Организация собственных промышленных производств на основе имеющихся в значительных количествах месторождений окисленных марганцевых руд

с получением конкурентоспособной на международном рынке продукции в Республике Казахстан является актуальной.

Таким образом, исследования термодинамического моделирования химических и фазовых превращений в условиях системы окисленная марганцевая руда – восстановитель при помощи комплексной программы «Астра-4» представляют научную новизну и экономическую значимость для металлургической промышленности Казахстана.

Целью работы являлась оценка влияния температуры и процентного содержания в системе восстановителя при термодинамическом моделировании восстановительной электроплавки [7 – 15] окисленной марганцевой руды, содержащей, % (по массе): 29,57 MnO; 6,02 FeO; 28,25 SiO₂; 2,63 CaO; 3,35 Al₂O₃; 0,50 MgO; 0,02 P; 17,53 п.п., с извлечением Mn, Si, и Fe в сплав.

При исследовании возможности восстановления металлов в системе окисленная марганцевая руда – восстановитель авторами было произведено термодинамическое моделирование при помощи комплексной программы «Астра-4» по восстановлению металлов в условиях системы при давлении 0,1 МПа и интервале температур от 1573 до 2573 К с различным количеством восстановителя.

Программный комплекс «Астра-4» основан на принципе максимума энтропии-фактора, связанного со степенью упорядоченности энергетического состоя-

ния микрочастиц, из которого состоит рабочее тело. Благодаря простоте постановки задачи моделирования, программный комплекс «Астра-4» позволяет использовать термодинамический метод для детального физико-химического изучения большого числа самых разнообразных высокотемпературных состояний и процессов [16 – 20].

Расчеты состава фаз и характеристик равновесия проводятся с использованием справочной базы данных по свойствам индивидуальных веществ. Основу информации в базе данных составляют термодинамические, теплофизические и термохимические свойства индивидуальных веществ, систематизированные в Институте высоких температур АН СССР, в национальном бюро стандартов США, опубликованные в периодической печати, монографиях, справочниках, а также обработанные и рассчитанные в МГТУ им. Н.Э. Баумана [16 – 20].

Согласно проведенным термодинамическим расчетам системы окисленная марганцевая руда – восстановитель (в качестве восстановителя рассматривался углерод с содержанием в системе 5, 15, 30 %), при 5 %-ном содержании восстановителя степень перехода марганца (α_{Mn} , %) в температурном интервале 1573 – 2573 К (рис. 1) составила в соединении (конденсированная фаза) kMn_5Si_3 от 0 до 26,42 %, в kMn_2SiO_4 от 50,85 до 90,22 %, в $kCaMnSiO_4$ во всем интервале до 9,773 %. Остальное количество марганца перераспределилось в газовую фазу, в Mn от 0,001 % при $T = 1573$ К до

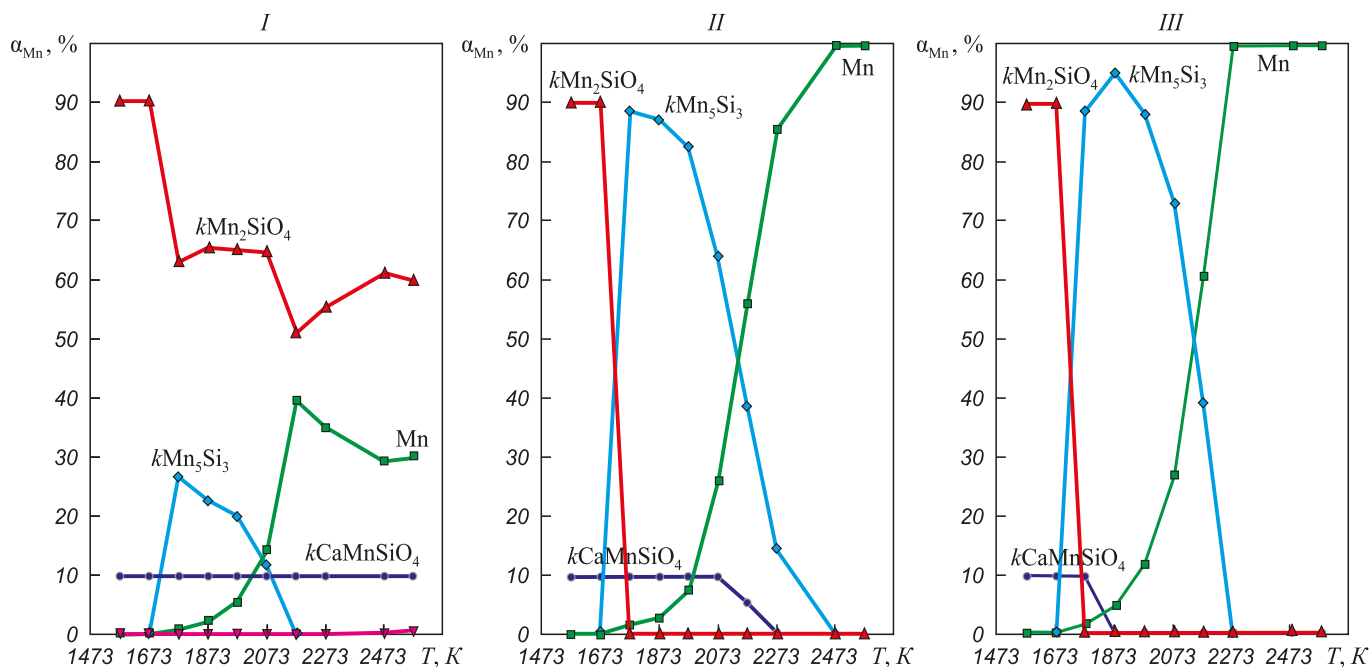


Рис. 1. Влияние температуры на степень распределения Mn в условиях системы окисленная марганцевая руда – углерод при давлении 0,1 МПа: I – C = 5 %; II – C = 15 %; III – C = 30 %

Fig. 1. Effect of temperature on the distribution degree of Mn in terms of the system of oxidized manganese ore – carbon at pressure of 0.1 MPa: I – C = 5 %; II – C = 15 %; III – C = 30 %

29,88 % при $T = 2573$ К, в MnO от 0 до 0,529 % в температурном интервале 1573 – 2573 К. При увеличении восстановителя до 15 % α_{Mn} в температурном интервале 1773 – 2273 К конденсированная фаза марганца распределилась в $k\text{Mn}_5\text{Si}_3$ от 88,66 до 14,37 % соответственно. В $k\text{Mn}_2\text{SiO}_4$ от 90,22 до 0 % соответственно при $T = 1573$ – 2173 К, в $k\text{CaMnSiO}_4$ от 9,77 до 5,26 % в интервале 1573 – 2173 К. Газовая фаза представлена распределением марганца в Mn от 0,0001 % при $T = 1573$ К до 99,99 % при $T = 2573$ К, в MnO от 0 до 0,004 % при температурном интервале 1573 – 2573 К. При дальнейшем увеличении восстановителя в исследуемой системе до 30 % степень перехода марганца в конденсированную фазу составила, в частности, в $k\text{Mn}_5\text{Si}_3$ от 95,3 при $T = 1873$ К до 39,1 при 2173 К. Газовая фаза представлена распределением марганца в Mn от 0,001 % при $T = 1573$ К до 99,99 % при $T = 2573$ К, в MnO от 0 до 0,001 % в температурном интервале 1573 – 2573 К.

На основании проведенного термодинамического анализа найдено уравнение (рис. 2), описывающее степень перехода марганца в силицид марганца ($k\text{Mn}_5\text{Si}_3$) в зависимости от содержания восстановителя при $T = 1873$ К. Уравнение имеет следующий вид: $\alpha_{\text{Mn}} = -27,606 + 11,234B - 0,2378B^2$, где B – восстановитель.

Величина достоверности аппроксимации (R^2) уравнения составила 1, что соответствует 100 %-ной достоверности аппроксимации.

На рис. 3 приведена информация о степени перехода кремния в различные фазовые состояния в зависимости от восстановителя. В системе, при 5 %-ном содержании восстановителя, степень перехода кремния (α_{Si} , %) при $T = 1573$ – 2573 К приведена на рис. 3. Видно, что кремний в системе распределился в $k\text{SiO}_2$ от 50,48 до 8,74 % при $T = 1573$ – 2473 К, в $k\text{Fe}_3\text{Si}$ от 5,52

до 5,51 % при $T = 1873$ – 2073 К, в $k\text{FeSiO}_3$ до 16,56 при $T = 2173$ – 2573 К, в $k\text{Mn}_2\text{SiO}_4$ от 40,69 до 22,94 %, в $k\text{Mn}_5\text{Si}_3$ от 14,3 до 6,18 % при $T = 1773$ – 2073 К, в $k\text{CaMnSiO}_4$ во всем интервале до 8,81 %. Газовая фаза представлена такими элементами и соединениями, как Si, Si_2 , SiO, SiO_2 , Si_2C , которые в сумме составляют от 0,00017 % при $T = 1773$ К до 47,63 % при $T = 2573$ К.

С увеличением восстановителя в системе до 15 % конденсированная фаза представлена следующими соединениями: при $T = 1573$ – 2073 К – $k\text{SiO}_2$ от 50,48 до 5,62 %; при $T = 2273$ К – $k\text{Ca}_2\text{SiO}_4$ до 1,4 %; при $T = 1873$ К – $k\text{FeSi}$ до 10,45 %; при $T = 2073$ – 2573 К – $k\text{Fe}_3\text{Si}$ от 5,49 до 1,95 %, достигая нулевого значения при $T = 2273$ К; при $T = 1773$ – 2273 К – $k\text{Fe}_5\text{Si}_3$ от 9,95 до 3,67 %, достигая нуля в температурном интервале 2073 – 2173 К; при $T = 1573$ – 1673 К – $k\text{Mn}_2\text{SiO}_4$ до 40,69 %; при $T = 1573$ – 2173 К – $k\text{CaMnSiO}_4$ от 8,81 до 4,75 %; при $T = 1773$ – 2073 К – $k\text{Mn}_5\text{Si}_3$ от 47,99 до 7,78 %. Газовая фаза представлена такими элементами и соединениями, как Si, Si_2 , Si_3 , SiO, SiO_2 , SiC_2 , Si_2C , Si_2C_2 , Si_3C , которые в сумме составляют от 0,00017 % при $T = 1773$ К до 98,045 % при $T = 2573$ К.

При увеличении восстановителя в системе до 30 % конденсированная фаза представлена следующим рядом соединений (рис. 3): $k\text{SiC}$ от 31,9 до 84,95 % при $T = 1873$ – 2573 К; $k\text{SiO}_2$ от 50,48 до 32,48 % при $T = 1573$ – 1773 К; $k\text{Ca}_2\text{SiO}_4$ от 4,4 до 0,76 % при $T = 1873$ – 2173 К; $k\text{Fe}_3\text{Si}$ от 5,49 до 2,9 % при $T = 2073$ – 2573 К; $k\text{Fe}_5\text{Si}_3$ от 9,95 до 9,93 % при $T = 1773$ – 1973 К; $k\text{Mn}_2\text{SiO}_4$ до 40,69 % при $T = 1573$ – 1673 К; $k\text{CaMnSiO}_4$ до 8,81 при $T = 1573$ – 1773 К; $k\text{Mn}_5\text{Si}_3$ от 21,18 до 51,61 % при $T = 1773$ – 2173 К. Газовая фаза представлена такими элементами и соединениями как, Si, Si_2 , Si_3 , SiO, SiO_2 , SiC, SiC_2 , Si_2C , Si_2C_2 , Si_3C , которые в сумме со-

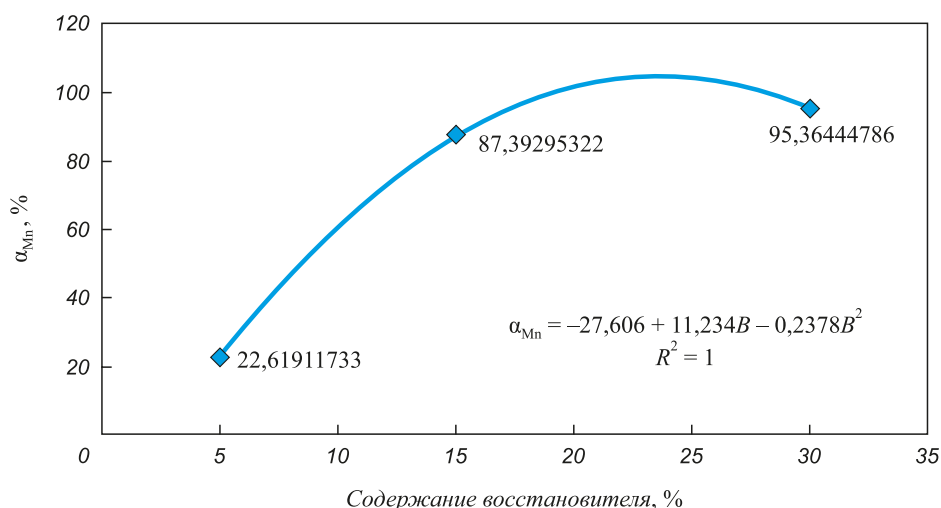


Рис. 2. Степень перехода марганца в $k\text{Mn}_5\text{Si}_3$ при $T = 1873$ К в зависимости от восстановителя

Fig. 2. Degree of manganese transition into $k\text{Mn}_5\text{Si}_3$ at $T = 1873$ K depending on the reducing agent

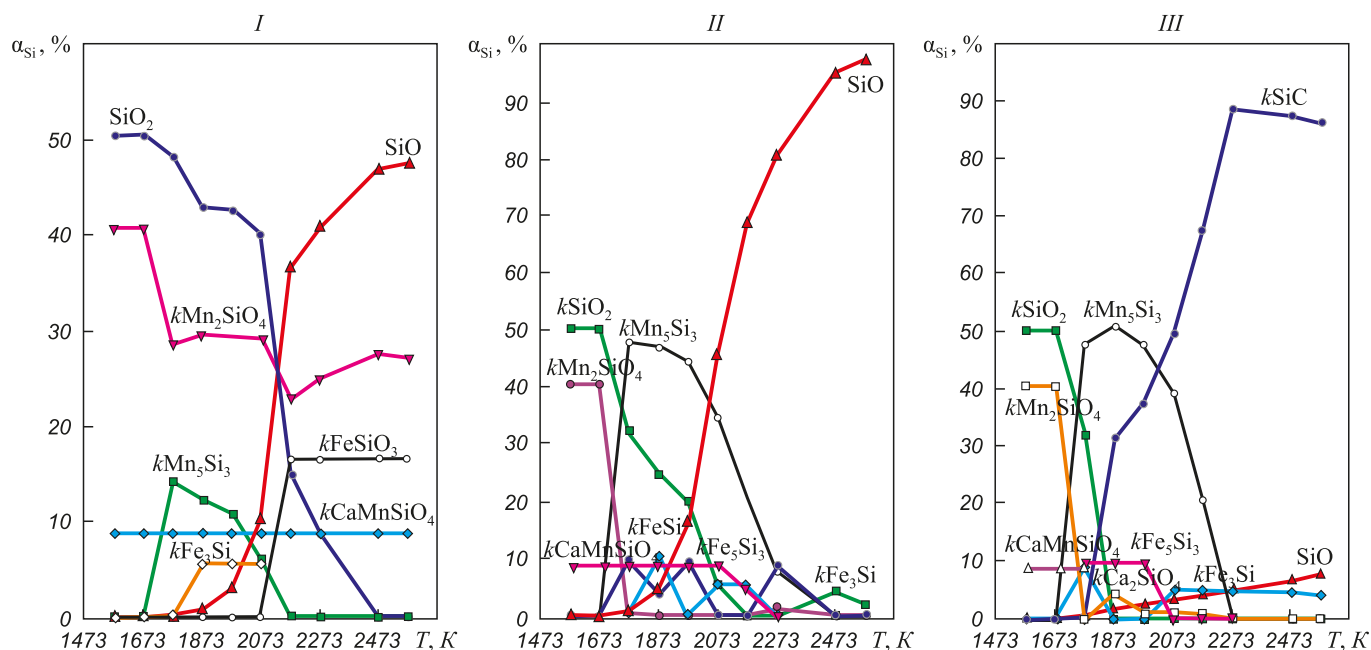


Рис. 3. Влияние температуры на степень распределения Si в условиях системы окисленная марганцевая руда – углерод при давлении 0,1 МПа:
I – C = 5 %; II – C = 15 %; III – C = 30 %

Fig. 3. Effect of temperature on the distribution degree of Si in terms of the system of oxidized manganese ore-carbon at pressure of 0.1 MPa:
I – C = 5 %; II – C = 15 %; III – C = 30 %

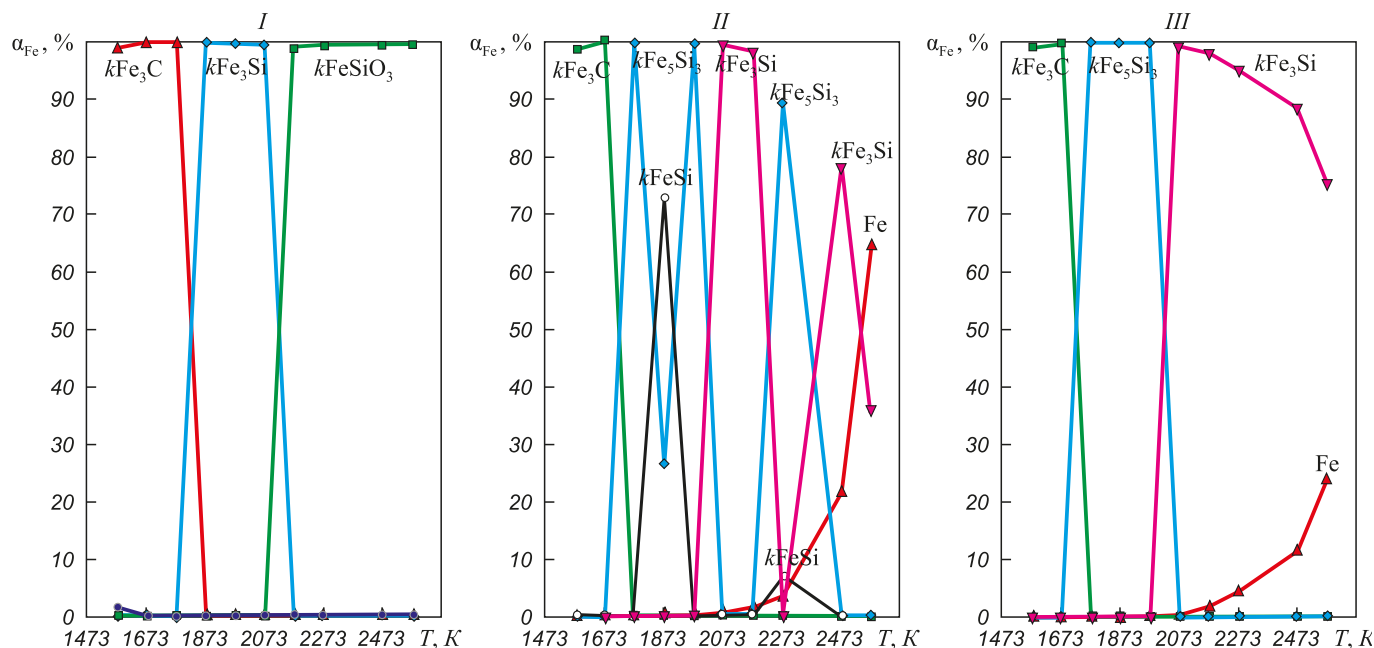


Рис. 4. Влияние температуры на степень распределения Fe в условиях системы окисленная марганцевая руда – углерод при давлении 0,1 МПа:
I – C = 5 %; II – C = 15 %; III – C = 30 %

Fig. 4. Effect of temperature on the distribution degree of Fe in terms of the system of oxidized manganese ore-carbon at a pressure of 0.1 MPa:
I – C = 5 %; II – C = 15 %; III – C = 30 %

ставляют от 0,00017 % при $T = 1773$ К до 97,09 % при $T = 2573$ К.

На рис. 4 приведена информация о степени перехода железа в различные фазовые состояния в зави-

симости от восстановителя. В системе с 5 %-ным содержанием восстановителя степень перехода железа (α_{Fe} , %) представлена на рис. 4, где железо распределилось в kFe_3C от 98,9 до 99,9 % при $T = 1573 - 1773$ К,

в $k\text{Fe}_2\text{P}$ до 1 % при $T = 1573$ К, в $k\text{Fe}_3\text{Si}$ от 99,9 до 99,7 % при $T = 1873 - 2073$ К, в $k\text{FeSiO}_3$ от 99,49 до 99,87 % при $T = 2173 - 2573$ К. Газовая фаза представлена Fe от 0,000003 до 0,12 % в интервале температур 1573 – 2573 К и FeO до 0,003 %, сумма которых в системе представлена до 0,12 % при $T = 2573$ К.

При увеличении восстановителя в системе до 15 % конденсированная фаза представлена следующими соединениями, в частности железо распределилось в $k\text{Fe}_3\text{C}$ до 99,9 % при $T = 1573 - 1673$ К, в $k\text{Fe}_5\text{Si}_3$ от 99,9 до 26,17 % при $T = 1773 - 2273$ К, показывая нулевые значения при $T = 2073 - 2173$ К, в $k\text{FeSi}$ от 73,8 до 7,03 % при $T = 1873$ и 2273 К соответственно, в $k\text{Fe}_2\text{P}$ до 1 % при $T = 1573$ К, в $k\text{Fe}_3\text{Si}$ от 99,45 до 35,26 % в температурном интервале 2073 – 2573 К, достигая нулевого значения при температуре 2273 К. Газовая фаза представлена элементарным Fe от 0,000003 до 64,73 % в интервале температур 1573 – 2573 К и FeO до 0,0005 %.

При дальнейшем увеличении восстановителя в системе до 30 % степень распределения железа показана на рис. 4, из которого видно, что конденсированная фаза представлена такими соединениями, как $k\text{Fe}_3\text{C}$ до 99,9 % при $T = 1573 - 1673$ К, $k\text{Fe}_2\text{P}$ до 1 % при $T = 1573$ К, $k\text{Fe}_5\text{Si}_3$ от 99,9 до 99,82 % при $T = 1773 - 1973$ К, $k\text{Fe}_3\text{Si}$ от 99,49 до 52,49 % в температурном интервале 2073 – 2573 К. Газовая фаза представлена элементарным Fe от 0,000003 до 47,5 % в интервале температур 1573 – 2573 К и следы FeO до 0,000001 %.

Выводы. На основании термодинамического анализа получено уравнение, описывающее степень перехода марганца в силицид марганца ($k\text{Mn}_5\text{Si}_3$) в зависимости от содержания восстановителя при $T = 1873$ К, которое имеет следующий вид: $\alpha_{\text{Mn}} = -27,606 + 11,234B - 0,2378B^2$ с величиной аппроксимации (R^2) = 1, которое показывает, что максимальная степень перехода марганца в $k\text{Mn}_5\text{Si}_3$ до 95,3 при $T = 1873$ К и 30 %-ном содержании восстановителя в системе, при дальнейшем увеличении температуры марганец начинает переходить в газовую фазу.

Кремний, в сравнении с марганцем, восстанавливается более трудно, и с увеличением температуры начинает переходить в газовую фазу, наиболее оптимальный температурный интервал восстановления кремния 1773 – 1873 К с содержанием восстановителя в системе от 15 до 30 %.

Степень перехода железа (α_{Fe} , %) в условиях системы в зависимости от температуры и содержания восстановителя позволила определить оптимальный температурный интервал 1773 – 1873 К при содержании восстановителя 15 %.

Проведенный термодинамический анализ системы наглядно продемонстрировал возможность получения сплава ферросиликомарганца из окисленных марганцевых руд месторождения Западный Камыс при их электроплавке с оптимумом при температуре 1873 К

и 15 %-ным содержанием восстановителя в системе. В частности, при выше указанных режимных параметрах конденсированная металлическая фаза, согласно расчетам, представлена соединениями $k\text{Mn}_5\text{Si}_3$, $k\text{FeSi}$, $k\text{Fe}_5\text{Si}_3$ с содержанием в предполагаемом сплаве марганца до 60,18 %, железа до 28,49 % и кремния до 11,32 %, что соответствует маркам FeMnSi_{12} и MnSi_{12} согласно ГОСТ 4756-91 ИСО 5447-80 Ферросиликомарганец. Технические требования и условия поставки.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Толымбеков М.Ж. Марганцеворудная отрасль Казахстана // Горный журнал Казахстана. 2007. № 2. С. 2 – 5.
2. Ужженов Б.С., Мазуров А.К., Селифонов Е.М. Состояние сырьевой базы железных, марганцевых и хромитовых руд Казахстана и перспективы развития черной металлургии на период до 2030 года // Индустрия Казахстана. 2003. № 10 (18). С. 23.
3. Святков Б.А., Толымбеков М.Ж., Байсанов С.О. Становление и развитие марганцевой отрасли Казахстана. – Алматы: Искандер, 2002. – 416 с.
4. Байсанов С.О., Толымбеков М.Ж., Святков Б.А. Состояние марганцевого производства в Казахстане // Состояние марганцеворудной базы России и вопросы обеспечения промышленности марганцем: Сб. науч. тр. – Красноярск. 2001. С. 32.
5. Байсанов А.С. Фазовые равновесия и кинетика процесса пирометаллургической переработки железомарганцевых руд: Дис. ... канд. тех. наук. – Караганда: ХМИ, 2007. – 168 с.
6. Толымбеков М.Ж., Такенов Т.Д., Ахметов А.Б. Прямое легирование стали марганцем. – Алматы: НИЦ «Гылым», 2003. – 304 с.
7. Nobuhiko T., Hatanaka A., Kaku H. etc. Development of iron-making Technology // Nippon Steel Technical Report. 2012. No. 101. P. 79 – 88.
8. Kolesnikov A.S. Kinetic investigations into the distillation of nonferrous metals during complex processing of waste of metallurgical industry // Russian Journal of Non-Ferrous Metals. 2015. Vol. 56. No. 1. P. 1 – 5.
9. Ying Yi Zhang, Yuan Hong Qi, ZongShu Zou, Yun Gang Li. Development prospect of rotary hearth furnace process in China // Advanced Materials Research. 2013. Vol. 746. P. 533 – 553.
10. Колесников А.С., Капсальмов Б.А., Колесникова О.Г. и др. Технология переработки отхода цинковой промышленности с получением ферросплава и возгонов цветных металлов // Вестник ЮУрГУ. 2013. № 1. С. 34 – 39.
11. Дашевский В.Я., Юсфин Ю.С., Подгородецкий Г.С., Баева Н.В. Производство марганцевых ферросплавов из марганцевых руд Усинского месторождения // Изв. вуз. Черная металлургия. 2013. Т. 56. № 9. С. 9 – 16.
12. Колесников А.С. Термодинамическое моделирование получения ферросплава и возгонов цветных металлов в системе клинкер вельцевания-углерод // Актуальные инновационные исследования: Наука и практика: Эл. науч. изд. 2013. № 2. С. 12 – 17. Режим доступа: http://actualresearch.ru/hn/2013_2.
13. Kim A.S. Smelting ferroalloys by means of borate ores // Steel in Translation. 2008. Vol. 38. No. 8. P. 664 – 667.
14. Колесников А.С. Термодинамическое моделирование получения ферроникеля из окисленных никелевых руд Казахстана // Вестник ЮУрГУ. 2014. № 1. С. 12 – 18.
15. Акбердин А.А., Юсфин Ю.С., Тойманкулов Т.Б. Диаграмма равновесного фазового состава системы Fe – Si – Mn – B // Изв. вуз. Черная металлургия. 2014. Т. 57. № 1. С. 40 – 42.
16. Dubinin N.E., Yuryev A.A., Vatolin N.A. Pseudopotential calculation of the structure and thermodynamics of liquid alkali metals with

- a square-well model as a reference system // *Journal of Structural Chemistry*. 2012. Vol. 53. No. 3. P. 468 – 475.
17. Синярев Г.Б., Ватолин Н.А., Трусов Б.Г. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов. – М.: Наука, 1982. – 32 с.
 18. Ватолин Н.А., Моисеев Г.К., Трусов Б.Г. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических системах. – М.: Металлургия, 1994. – 352 с.

19. Белов Г.В. Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы. – М.: Научный Мир, 2002. – 184 с.
20. Температурные зависимости приведенной энергии Гиббса некоторых неорганических веществ / Г.К. Моисеев, Н.А. Ватолин, Л.А. Маршук, Н.И. Ильиных. – Екатеринбург: Институт металлургии УрО РАН, 1997. – 231 с.

Поступила 4 августа 2016 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2017. Vol. 60. No. 9, pp. 759–765.

THERMODYNAMIC SIMULATION OF CHEMICAL AND PHASE TRANSFORMATIONS IN THE SYSTEM OF OXIDIZED MANGANESE ORE – CARBON

A.S. Kolesnikov¹, I.V. Sergeeva², N.E. Botabaev¹,
A.Zh. Al'zhanova¹, Kh.A. Ashirbaev¹

¹ Kazakhstan South State University named after M.O. Auezov, Shymkent, Republic of Kazakhstan

² Saratov State Agrarian University named after N.I. Vavilov, Saratov, Russia

Abstract. Thermodynamic simulation of chemical and phase transformations was made for the system of oxidized manganese ore – carbon. Prediction of thermodynamic simulation of chemical and phase transformations in the system was carried out using “Astra 4” multipurpose software system designed for simulation of equilibrium states and processes in high temperature systems with chemical and phase transformations developed in Bauman MSTU. Calculations of phase composition and characteristics of the equilibrium were carried out using the reference database on properties of individual substances. The basis for information in the database of “Astra 4” software complex are thermodynamic, thermo-physical and thermochemical properties of individual substances, which were systematized at the Institute of High Temperatures of USSR Academy of Sciences and National Bureau of Standards of the United States, published in periodicals, monographs, handbooks, and processed and calculated in Bauman MSTU. The study of simulation of chemical and phase transformations in the system were carried out in the temperature range of 1573 – 2573 K with carbon content of 5 – 10 – 15 % in the system and pressure of 0.1 MPa. During the simulation it was found that the maximum transition degree of manganese into $k\text{Mn}_5\text{Si}_3$ is up to 95.3 % at $T = 1873$ K and 30 % content of reductant in the system, with further increase in temperature, the manganese begins to move in to the gas phase. Silicon in comparison with manganese, recovers more difficultly, and with temperature increasing begins to transit into the gas phase, the most optimal temperature interval of silicon recovery is 1773 – 1873 K with the content of reductant in the system from 15 to 30 %. The transition degree of iron (α_{Fe} , %) in the system depending on temperature and % content of the reducing agent, allowed to determine the optimal temperature range of 1773 – 1873 K when the content of the reducing agent is 15 %. Thermodynamic modeling of phase transitions of the system manganese ore – reducing agent allowed to perform the opportunity of obtaining ferro-silico-manganese from refractory oxidized manganese ore of “Western Kamys” deposit by electric smelting.

Keywords: thermodynamic analysis, chemical and phase transformations, modeling, manganese, silicon, iron, oxidized manganese ore, gas and condensed phases, metals, electric smelting, ferroalloys.

DOI: 10.17073/0368-0797-2017-9-759-765

REFERENCES

1. Tolymbekov M.Zh. Manganese ore industry of Kazakhstan. *Gornyi zhurnal Kazakhstana*. 2007, no. 2, pp. 2–5. (In Russ.).
2. Uzhkenov B.S., Mazurov A.K., Selifonov E.M. The state of resource base of iron, manganese and chromite ores of Kazakhstan and development prospects of ferrous metallurgy in the period up to 2030. *Industriya Kazakhstana*. 2003, no. 10 (18), p. 23. (In Russ.).
3. Svyatov B.A., Tolymbekov M.Zh., Baisanov S.O. *Stanovlenie i razvitie margantsevoi otrasli Kazakhstana* [Formation and development of manganese industry of Kazakhstan]. Almaty: Iskander, 2002, 416 p. (In Russ.).
4. Baisanov S.O., Tolymbekov M.Zh., Svyatov B.A. Manganese production in Kazakhstan. In: *Sostoyanie margantsevorudnoi bazy Rossii i voprosy obespecheniya promyshlennosti margantsem: sb. nauch. tr.* [State of the manganese ore basis in Russia and manganese supply to industry: Coll. of sci. papers]. Krasnoyarsk, 2001, p. 32. (In Russ.).
5. Baisanov A.S. *Fazovye ravnovesiya i kinetika protessa pirometallurgicheskoi pererabotki zhelezomargantsevykh rud: dis...kand. tekhn. nauk* [Phase equilibria and kinetics of pyrometallurgical processing of iron-manganese ores: Cand. Tech. Sci. Diss.]. Karaganda: KhMI, 2007, 168 p. (In Russ.).
6. Tolymbekov M.Zh., Takenov T.D., Akhmetov A.B. *Pryamoe legirovanie stali margantsem* [Direct alloying of steel with manganese]. Almaty: NITs «Filyum», 2003, 304 p. (In Russ.).
7. Nobuhiko T., Hatanaka A., Kaku H., Kurihara K., Saitoh G. Development of iron-making technology. *Nippon Steel Technical Report*. 2012, no. 101, pp. 79–88.
8. Kolesnikov A.S. Kinetic investigations into the distillation of non-ferrous metals during complex processing of waste of metallurgical industry. *Russian Journal of Non-Ferrous Metals*. 2015, vol. 56, no. 1, pp. 1–5.
9. Ying Yi Zhang, Yuan Hong Qi, Zong Shu Zou, Yun Gang Li. Development prospect of rotary hearth furnace process in China. *Advanced Materials Research*. 2013, vol. 746, pp. 533–553.
10. Kolesnikov A.S., Kapsalyamov B.A., Kolesnikova O.G., Kuraev R.M., Stryukovskii I.A. Processing technology for waste of zinc industry to produce ferroalloy and sublimates of non-ferrous metals. *Vestnik YuUrGU*. 2013, no. 1, pp. 34–39. (In Russ.).
11. Dashevskii V.Ya., Yusfin Yu.S., Podgorodetskii G.S., Baeva N.V. Production of manganese ferroalloys of manganese ore from Usinskoye field. *Izvestiya VUZov. Chernaya metallurgiya = Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2013, vol. 56, no. 9, pp. 9–16. (In Russ.).
12. Kolesnikov A.S. Thermodynamic modeling of production of ferroalloy and sublimates of non-ferrous metals in the system milling clinker – carbon. *Aktual'nye innovatsionnye issledovaniya: Nauka i praktika*. 2013, no. 2, pp. 12–17. Electronic resource. Available at URL: http://actualresearch.ru/nn/2013_2 (In Russ.).
13. Kim A.S. Smelting ferroalloys by means of borate ores. *Steel in Translation*. 2008, vol. 38, no. 8, pp. 664–667.
14. Kolesnikov A.S. Thermodynamic modeling of ferronickel production from oxidized nickel ores of Kazakhstan. *Vestnik YuUrGU*. 2014, no. 1, pp. 12–18. (In Russ.).
15. Akberdin A.A., Yusfin Yu.S., Toimankulov T.B. Chart of equilibrium phase composition of Fe – Si – Mn – B. *Izvestiya VUZov. Chernaya metallurgiya = Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2014, vol. 57, no. 1, pp. 40–42. (In Russ.).

16. Dubinin N.E., Yuryev A.A., Vatolin N.A. Pseudopotential calculation of the structure and thermodynamics of liquid alkali metals with a square-well model as a reference system. *Journal of Structural Chemistry*. 2012, vol. 53, no. 3, pp. 468–475.
17. Sinyarev G.B., Vatolin N.A., Trusov B.G. *Primenenie EVM dlya termodinamicheskikh raschetov metallurgicheskikh protsessov* [The use of computers for thermodynamic calculations of metallurgical processes]. Moscow: Nauka, 1982, 32 p. (In Russ.).
18. Vatolin N.A., Moiseev G.K., Trusov B.G. *Termodinamicheskoe modelirovanie v vysokotemperaturnykh neorganicheskikh sistemakh* [Thermodynamic modeling in high temperature inorganic systems]. Moscow: Metallurgiya, 1994, 352 p. (In Russ.).
19. Belov G.V. *Termodinamicheskoe modelirovanie: metody, algoritmy, programmy* [Thermodynamic modeling: methods, algorithms, programs]. Moscow: Nauchnyi Mir, 2002, 184 p. (In Russ.).
20. Moiseev G.K., Vatolin N.A., Marshuk L.A., Il'inykh N.I. *Temperaturnye zavisimosti privedennoi energii Gibbsa nekotorykh neor-*

ganicheskikh veshchestv [Temperature dependences of the reduced Gibbs energy of some inorganic substances]. Ekaterinburg: Institut metallurgii UrO RAN, 1997, 231 p. (In Russ.).

Information about the authors:

A.S. Kolesnikov, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor of the Chair "Technology of Cement, Ceramics and Glass" (kas164@yandex.ru)

I.V. Sergeeva, Dr. Sci. (Biological), Professor, Head of the Chair "Botany, Chemistry and Ecology"

N.E. Botabaev, Dr. Sci. (Eng.), Professor, Dean of the Higher School of Textile and Food Engineering

A.Zh. Al'zhanova, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor, Head of the Chair "Technology of Cement, Ceramics and Glass"

Kh.A. Ashirbaev, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor, Head of the Chair "Mathematics for Technical Specialties"

Received August 4, 2016