

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИАГРАММЫ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

**О.В. Самойлова, Л.А. Макровец**

*Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия*

Щелочноземельные металлы (ЩЗМ) в последнее время становятся все более востребованными при производстве сталей и сплавов и являются частью большинства композиций для рафинирования и модифицирования. В связи с этим возрастает необходимость построения диаграмм состояния оксидных (шлаковых) систем, включающих в качестве компонентов оксиды ЩЗМ, в частности BaO. Эти сведения необходимы как для анализа состава образующихся неметаллических включений, так и для понимания влияния концентрации оксидов ЩЗМ на температуру плавления шлака. Как известно, термодинамическое моделирование является ключевым инструментом для выбора оптимального направления проводимых исследований в области металлургических технологий, поэтому расчет фазовых диаграмм оксидных систем как части многокомпонентного шлакового расплава является важной задачей для исследователей. Особенно это актуально для систем, содержащих BaO в качестве компонента, так как имеющиеся в литературе данные ограничиваются практически только диаграммами состояния двойных систем. В настоящей работе была построена поверхность ликвидус фазовой диаграммы системы FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Для термодинамического моделирования использовали теорию субрегулярных ионных растворов, энергетические параметры которой были подобраны в ходе настоящего расчета. Также нами были оценены температуры, энтальпии и энтропии образования алюминатов бария Ba<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>, BaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, BaAl<sub>12</sub>O<sub>19</sub> из компонентов оксидного расплава. Эти значения для Ba<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub> оказались равны 1604 °С, 159 410 Дж/моль, 16,215 Дж/(моль·К); для BaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> – 1814 °С, 101 424 Дж/моль, 7,332 Дж/(моль·К); для BaAl<sub>12</sub>O<sub>19</sub> – 1911 °С, 613 406 Дж/моль, 201,201 Дж/(моль·К) соответственно. Полученные сведения были сравнены с имеющимися немногочисленными литературными данными.

*Ключевые слова: термодинамическое моделирование, фазовые равновесия, теория субрегулярных ионных растворов, система FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, оксид бария.*

В связи с все более широким применением щелочноземельных металлов (в частности бария) для рафинирования и модифицирования сталей и сплавов [1–5] возрастает актуальность исследований оксидных (шлаковых) систем, включающих в качестве компонента оксид бария BaO.

Влияние концентрации оксида бария на технологические параметры металлургических шлаков и флюсов можно найти в работах [6–9]. Однако для анализа технологических аспектов металлургического производства также важно и знание диаграмм состояния оксидных (шлаковых) систем. В атласе шлаков [10] представлена некоторая информация о диаграммах состояния оксидных систем с BaO, но данных для большинства практически значимых систем не приводится. Нет сведений и по диаграмме FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, в то время как она является ключевой для дальнейшей оценки влияния оксида бария на фазовый состав и температуру плавления барийсодержащих многокомпонентных оксидных систем.

Следует отметить, что для оценки фазовых равновесий как в металлических, так и в оксидных системах на настоящий момент широко используются методики термодинамического моделирования [11]. Применимость методик расчета из монографии Г.Г. Михайлова и др. [11] для некоторых систем с барием и оксидом бария рассматривалась нами ранее в работе [5].

Целью же настоящей работы является термодинамическое моделирование диаграммы состояния системы FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Для выполнения указанной цели было необходимо в первую очередь провести моделирование диаграмм состояния двойных оксидных систем FeO–BaO, FeO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, а уже затем на основании полученных данных построить поверхность ликвидус для системы FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Термодинамическое моделирование двойных и тройной оксидных систем проводили с использованием теории субрегулярных ионных растворов [11]. Значения параметров мо-

дели определяли в процессе решения систем нелинейных уравнений, для чего применялся метод Ньютона. Используя сведения о координатах ряда опорных точек (точек фазовых переходов, эвтектических или перитектических превращений и т. п.) на выбранной фазовой диаграмме, составлялись выражения, связывающие данные о равновесных составах при данной температуре с параметрами модели. С использованием этих данных подбирались энергетические параметры теории, а уже затем моделировалась вся линия или поверхность ликвидус исследуемой системы.

Системы FeO–BaO и FeO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> были рассчитаны по указанному алгоритму нами ранее [12, 13]. Согласно полученным в ходе расчета данным система FeO–BaO представляет собой диаграмму с простой эвтектикой с координатами 31,58 мол. % BaO и 1066 °C [12]. Диаграмма состояния системы FeO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> характеризуется двумя эвтектическими равновесиями (координаты точек эвтектики: 5 мас. % и 1335 °C; 65 мас. % и 1765 °C) и наличием соединения FeAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, которое плавится конгруэнтно при температуре 1770 °C [13].

Для расчета систем Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–BaO и FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в настоящей работе согласно указанному алгоритму использовались данные по температурам, энтальпиям и энтропиям плавления чистых оксидов и их соединений

(табл. 1). Термодинамические данные о плавлении герцинита были оценены нами ранее в работе [13], а сведения по алюминатам бария были получены в ходе настоящего исследования.

Энергетические параметры теории субрегулярных ионных растворов для расчета исследуемых систем приведены в табл. 2. Следует отметить, что в системе Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–BaO для использования выражений для расчета активностей компонентов оксидного расплава оксиду алюминия был присвоен индекс «1», а оксиду бария – индекс «2». В системе FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> оксиду железа был присвоен индекс «1», оксиду бария – «2», оксиду алюминия – «3». При изменении порядка и индексирования компонентов систем энергетические параметры необходимо менять местами, так как они описывают взаимодействие ионов в расплаве относительно первого компонента.

Результаты моделирования диаграммы состояния системы Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–BaO приведены на рис. 1 и в табл. 3 в сравнении с литературными данными [17, 18]. Как видно из сравнения, мы при моделировании опирались прежде всего на экспериментальные данные, полученные G. Purт [17]. Данные из работы Н.А. Торопова и Ф.Я. Галахова [18] характеризуются значительно более высокими температурами большинства невариантных равновесий.

Таблица 1

Температуры, энтальпии и энтропии плавления чистых оксидов и их соединений

Вещество	Температура плавления, °C	Энтальпия плавления, Дж/моль	Энтропия плавления, Дж/(моль·К)
FeO	1378 [14]	33 470 [15]	20,273
BaO	1925 [14]	57 768 [16]	26,282
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2051 [14]	107 530 [14]	46,269
FeAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	1770 [13]	217 584 [13]	87,454 [13]
Ba <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	1604	159 410	16,215
BaAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	1814	101 424	7,332
BaAl <sub>12</sub> O <sub>19</sub>	1911	613 406	201,201

Таблица 2

Энергетические параметры теории субрегулярных ионных растворов для расчета диаграммы состояния системы FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Система	Энергетические параметры $Q_{ijkl}$ , Дж/моль		
FeO–BaO [12]	–22 505	–35 041	–27 933
FeO–Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> [13]	+212	–21 502	–11 091
BaO–Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> *	–88 680	–42 147	–135 547
FeO–BaO–Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	–117 158	–163 302	–199 832

\* Примечание. Для расчета диаграммы состояния системы Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–BaO первый и последний параметры необходимо поменять местами

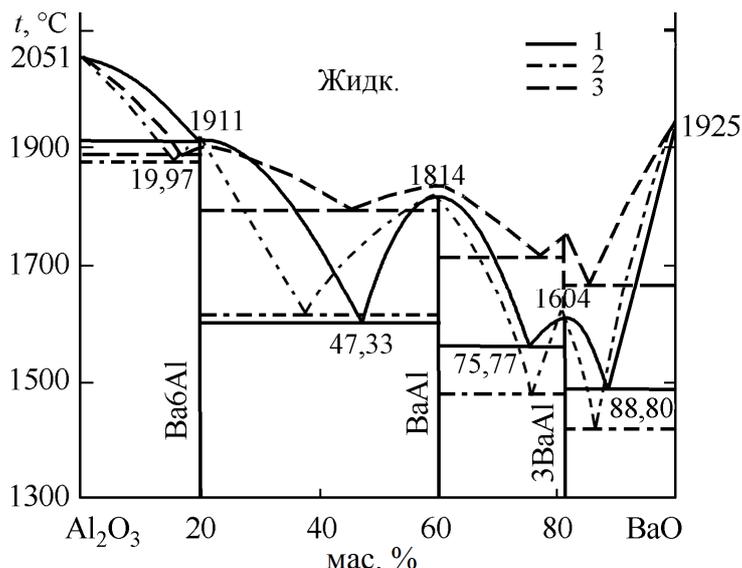


Рис. 1. Диаграмма состояния системы Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–BaO: 1 – результаты проведенного нами моделирования; 2 – экспериментальные данные G. Purт [17]; 3 – экспериментальные данные Н.А. Торопова и Ф.Я. Галахова [18]. Ba<sub>6</sub>Al – BaAl<sub>12</sub>O<sub>19</sub>; BaAl – BaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>; 3BaAl – Ba<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>

Таблица 3

Координаты точек невариантных равновесий в системе Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–BaO

Равновесие	Координаты			Источник
	мас. % BaO	$x_{Ba^{2+}}$	$t, ^\circ C$	
Ж ↔ Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> + BaAl <sub>12</sub> O <sub>19</sub>	16,00	0,060	1875	[17]
	17,00	0,063	1890	[18]
	19,97	0,077	1910	[Настоящая работа]
Ж ↔ BaAl <sub>12</sub> O <sub>19</sub> + BaAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	38,00	0,169	1620	[17]
	45,00	0,214	1790	[18]
	47,33	0,230	1600	[Настоящая работа]
Ж ↔ BaAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> + Ba <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	76,50	0,520	1485	[17]
	77,50	0,534	1710	[18]
	75,77	0,510	1569	[Настоящая работа]
Ж ↔ Ba <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>6</sub> + BaO	90,00	0,749	1425	[17]
	85,00	0,653	1660	[18]
	88,80	0,725	1485	[Настоящая работа]

В целом рассчитанная нами линия ликвидус диаграммы состояния системы Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–BaO занимает промежуточное положение между данными [17] и [18].

Полученные температуры плавления алюминатов бария сравнимы с литературными данными [17–19]. Так, для гексаалюмината бария было получено значение  $t_{расч} = 1911$  °C, что сопоставимо с 1915 [17], 1900 [18] и

1860 °C [19]. Для моноалюмината бария  $t_{расч} = 1814$  °C, в то же время это значение 1815 [17], 1830 [18] и 2000 °C [19]. А для Ba<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub> согласно моделированию  $t_{расч} = 1604$  °C, что сопоставимо с 1620 °C по данным G. Purт [17], но значительно ниже, чем 1750 °C по данным Н.А. Торопова и Ф.Я. Галахова [18].

Расчет поверхности ликвидус в системе FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> опирался на оценочные дан-

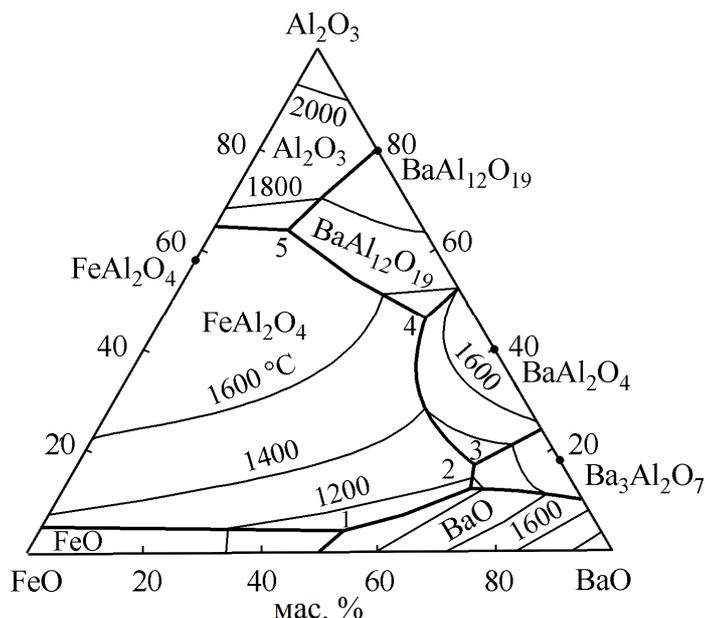


Рис. 2. Результаты расчета поверхности ликвидус диаграммы состояния системы FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Координаты точек 1–5 приведены в табл. 4

Таблица 4

Координаты точек невариантных равновесий в системе FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

№ точки	Координаты						t, °C
	FeO		BaO		Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>		
	мас. %	x <sub>Fe<sup>2+</sup></sub>	мас. %	x <sub>Ba<sup>2+</sup></sub>	мас. %	x <sub>Al<sup>3+</sup></sub>	
1	43,86	0,5968	52,60	0,3353	3,54	0,0679	1039
2	17,80	0,2605	69,42	0,4760	12,77	0,2634	1160
3	14,73	0,2079	68,06	0,4500	17,20	0,3421	1217
4	8,01	0,0844	45,42	0,2242	46,57	0,6914	1499
5	22,77	0,1912	13,25	0,0521	63,98	0,7568	1729

ные работы [5], на расчет двойных оксидных систем в работах [12, 13] и на результаты, полученные в ходе настоящего исследования.

Поверхность ликвидус диаграммы состояния системы FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> приведена на рис. 2, в табл. 4 представлены координаты точек невариантных равновесий. На диаграмму нанесены изотермические сечения от 1200 до 2000 °C с шагом в двести градусов.

Согласно рис. 2 для большинства составов системы FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в равновесии с оксидным расплавом будет находиться герцинит FeAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. Алуминаты бария будут выходить на поверхность ликвидус при достаточно больших концентрациях оксида бария (более 40 мас. %). Равновесие оксидного расплава с наиболее тугоплавким веществом в системе (корундом) начинает реализовываться при его концентрации более чем 60 мас. %.

### Выводы

Проведено термодинамическое моделирование диаграмм состояния систем Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–BaO и FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Определены энергетические параметры теории субрегулярных ионных растворов для расчета активностей компонентов оксидного расплава исследуемых систем. Получены термодинамические данные (температуры, энтальпии и энтропии) образования алуминатов бария из компонентов оксидного расплава. Результаты настоящего исследования позволяют перейти к решению проблем рафинирования и модифицирования сталей барийсодержащими лигатурами, а также оценить влияние образующегося в ходе технологического процесса оксида бария на параметры шлакового расплава. В частности, можно заключить, что для большинства составов систе-

мы FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в равновесии с оксидным расплавом будет находиться герцинит FeAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>.

Работа выполнена при поддержке Правительства РФ (Постановление № 211 от 16.03.2013 г.), соглашение № 02.А03.21.0011.

### Литература

1. Breitzmann, M. Refining of steel melts using alkaline earth metals / M. Breitzmann, H.-J. Engell, D. Janke // *Steel Research*. – 1988. – Vol. 59, no. 7. – P. 289–294. DOI: 10.1002/srin.198801505
2. Перспективы применения барийсодержащих лигатур для раскисления и модифицирования транспортного металла / К.В. Григорович, К.Ю. Демин, А.М. Арсенкин, А.К. Гарбер // *Металлы*. – 2011. – № 5. – С. 146–156.
3. Критерии оценки качества раскислителей и модификаторов для стали / И.В. Рябчиков, В.Г. Мизин, Р.Г. Усманов и др. // *Сталь*. – 2015. – № 2. – С. 24–27.
4. Экспериментальное исследование рафинирования и модифицирования стали сплавами Si–Ca, Si–Sr и Si–Ba / И.В. Бакин, Н.А. Шабурова, И.В. Рябчиков и др. // *Сталь*. – 2019. – № 8. – С. 14–18.
5. Михайлов, Г.Г. Барий как раскислитель и модификатор жидкой стали / Г.Г. Михайлов, Л.А. Макровец, Д.А. Выдрин // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия»*. – 2013. – Т. 13, № 1. – С. 45–50.
6. Gao, E. Effect of alkaline earth metal oxides on the viscosity and structure of the CaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> based mold flux for casting high-Al steels / E. Gao, W. Wang, L. Zhang // *Journal of Non-Crystalline Solids*. – 2017. – Vol. 473. – P. 79–86. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2017.07.029
7. Viscosities of CaO–SiO<sub>2</sub>–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–(R<sub>2</sub>O or RO) melts / S. Sukenaga, N. Saito, K. Kawakami, K. Nakashima // *ISIJ International*. – 2006. – Vol. 46, no. 3. – P. 352–358. DOI: 10.2355/isijinternational.46.352
8. Wang, Z. Effect of substituting CaO with BaO on the viscosity and structure of CaO–BaO–SiO<sub>2</sub>–MgO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> slags / Z. Wang, I. Sohn // *Journal of the American Ceramic Society*. – 2018. – Vol. 101. – P. 4285–4296. DOI: 10.1111/jace.15559
9. Effect of substituting CaO with BaO and CaO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ratio on the viscosity of CaO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–CaF<sub>2</sub>–Li<sub>2</sub>O mold flux system / Z. Li, X. You, M. Li et al. // *Metals*. – 2019. – Vol. 9. – P. 142. DOI: 10.3390/met9020142
10. *Slag Atlas*. 2nd Edition. Edited by Verein Deutscher Eisenhüttenleute (VDEh). – Düsseldorf: Verlag Stahleisen GmbH, 1995. – 616 p.
11. Михайлов, Г.Г. Термодинамика металлургических процессов и систем / Г.Г. Михайлов, Б.И. Леонович, Ю.С. Кузнецов. – М.: Издат. Дом МИСус, 2009. – 520 с.
12. Самойлова, О.В. Фазовая диаграмма системы FeO–SrO–BaO / О.В. Самойлова, Л.А. Макровец, И.В. Бакин // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия»*. – 2020. – Т. 20, № 3. – С. 5–11. DOI: 10.14529/met200301
13. Samoilo, O.V. Thermodynamic modeling of phase equilibria in the FeO–MgO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system / O.V. Samoilo, L.A. Makrovets // *Materials Science Forum*. – 2020. – Vol. 989. – P. 3–9. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.989.3
14. Кубашевский, О. Металлургическая термехимия / О. Кубашевский, С.Б. Олкокк. – М.: *Металлургия*, 1982. – 392 с.
15. Darken, L.S. The system iron–oxygen. II. Equilibrium and thermodynamics of liquid oxide and other phases / L.S. Darken, R.W. Gurry // *Journal of American Chemical Society*. – 1946. – Vol. 68. – P. 798–816.
16. Физико-химические свойства окислов. Справочник / под ред. Г.В. Самсонова. – М.: *Металлургия*, 1969. – 456 с.
17. Pirt, G. Binary system BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / G. Pirt // *Radex Rundschau*. – 1960. – Vol. 4. – P. 198–202.
18. Торопов, Н.А. Диаграмма состояния системы BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / Н.А. Торопов, Ф.Я. Галахов // *Доклады АН СССР*. – 1962. – Т. 82, № 1. – С. 69–70.
19. *Critical Melting Points and Reference Data for Vacuum Heat Treating* / Ed. by V. Osterman, H. Antes Jr. – Solar Atmospheres Inc., 2010. – 42 p.

Самойлова Ольга Владимировна, канд. хим. наук, старший научный сотрудник кафедры материаловедения и физико-химии материалов, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; [samoilovaov@susu.ru](mailto:samoilovaov@susu.ru).

Макровец Лариса Александровна, инженер кафедры материаловедения и физико-химии материалов, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; [makrovetsla@susu.ru](mailto:makrovetsla@susu.ru).

*Поступила в редакцию 13 мая 2021 г.*

---

DOI: 10.14529/met210302

### THERMODYNAMIC MODELING OF THE FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> PHASE DIAGRAM

*O.V. Samoylova, [samoilovaov@susu.ru](mailto:samoilovaov@susu.ru),*

*L.A. Makrovets, [makrovetsla@susu.ru](mailto:makrovetsla@susu.ru)*

*South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation*

Alkaline earth metals have recently become more and more in demand in the production of steels and alloys and are part of most compositions for refining and modification. In this connection, the need to construct the phase diagrams of the oxide (slag) systems, including alkali-earth metals oxides as components, in particular BaO, increases. This information is necessary both for analyzing the composition of the formed non-metallic inclusions and for understanding the effect of the concentration of alkali-earth metals oxides on the melting point of the slag. As is known, thermodynamic modeling is a key tool for choosing the optimal direction of research in the field of metallurgical technologies, therefore, the calculation of phase diagrams of oxide systems as part of a multicomponent slag melt is an important task for researchers. This is especially true for systems containing BaO as a component, since the data available in the literature are limited only to phase diagrams of binary systems. In this work, the surface of the liquidus of the FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> phase diagram was plotted. The theory of subregular ionic solutions was used, the energy parameters of which were obtained in the course of this calculation. We also estimated the temperatures, enthalpies and entropies of formation of barium aluminates Ba<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub>, BaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, BaAl<sub>12</sub>O<sub>19</sub> from the components of the oxide melt. These values for Ba<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>6</sub> turned out to be 1604 °C, 159 410 J/mol, 16.215 J/(mol·K); for BaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> – 1814 °C, 101 424 J/mol, 7.332 J/(mol·K); for BaAl<sub>12</sub>O<sub>19</sub> – 1911 °C, 613 406 J/mol, 201.201 J/(mol·K), respectively. The information obtained was compared with the few available literature data.

*Keywords: thermodynamic modeling, phase equilibria, theory of subregular ionic solutions, FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system, barium oxide.*

The work was supported by Act 211 Government of the Russian Federation, contract No. 02.A03.21.0011.

#### References

1. Breitzmann M., Engell H.-J., Janke D. Refining of Steel Melts Using Alkaline Earth Metals. *Steel Research*, 1988, vol. 59, no. 7, pp. 289–294. DOI: 10.1002/srin.198801505
2. Grigorovich K.V., Demin K.Yu., Arsenkin A.M., Garber A.K. Prospects of the Application of Barium-Bearing Master Alloys for the Deoxidation and Modification of a Railroad Metal. *Russian Metallurgy (Metally)*, 2011, vol. 2011, no. 9, pp. 912–920. DOI: 10.1134/S0036029511090126
3. Ryabchikov I.V., Mizin V.G., Usmanov R.G., Golubtsov V.A., Milyuts V.G. Assessing the Quality of Reducing and Modifying Agents for Steel. *Steel in Translation*, 2015, vol. 45, no. 2, pp. 137–140. DOI: 10.3103/S0967091215020138
4. Bakin I.V., Shaburova N.A., Ryabchikov I.V., Mizin V.G., Belov B.F., Mikhailov G.G., Senin A.V. Experimental Study of Refining and Modification of Steel with Si–Ca, Si–Sr, and Si–Ba Alloys. *Steel in Translation*, 2019, vol. 49, no. 8, pp. 543–547. DOI: 10.3103/S0967091219080023

5. Mikhailov G.G., Makrovets L.A., Vydrin D.A. Barium as Deoxidant and Modifier of Liquid Steel. *Bulletin of the South Ural State University Ser. Metallurgy*, 2013, vol. 13, no. 1, pp. 45–50. (in Russ.)
6. Gao E., Wang W., Zhang L. Effect of Alkaline Earth Metal Oxides on the Viscosity and Structure of the CaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Based Mold Flux for Casting High-Al Steels. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2017, vol. 473, pp. 79–86. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2017.07.029
7. Sukenaga S., Saito N., Kawakami K., Nakashima K. Viscosities of CaO–SiO<sub>2</sub>–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–(R<sub>2</sub>O or RO) Melts. *ISIJ International*, 2006, vol. 46, no. 3, pp. 352–358. DOI: 10.2355/isijinternational.46.352
8. Wang Z., Sohn I. Effect of Substituting CaO with BaO on the Viscosity and Structure of CaO–BaO–SiO<sub>2</sub>–MgO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Slags. *Journal of the American Ceramic Society*, 2018, vol. 101, pp. 4285–4296. DOI: 10.1111/jace.15559
9. Li Z., You X., Li M., Wang Q., He S., Wang Q. Effect of Substituting CaO with BaO and CaO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Ratio on the Viscosity of CaO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–CaF<sub>2</sub>–Li<sub>2</sub>O Mold Flux System. *Metals*, 2019, vol. 9, pp. 142. DOI: 10.3390/met9020142
10. Slag Atlas. 2nd Edition. Edited by Verein Deutscher Eisenhüttenleute (VDEh). *Düsseldorf: Verlag Stahleisen GmbH*, 1995. 616 p.
11. Mikhailov G.G., Leonovich B.I., Kuznetsov Yu.S. *Termodinamika metallurgicheskikh protsessov i sistem* [Thermodynamics of Metallurgical Processes and Systems]. *Moscow: MISIS Publ.*, 2009. 520 p. (in Russ.)
12. Samoiloва O.V., Makrovets L.A., Bakin I.V. A Phase Diagram of the FeO–SrO–BaO System. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Metallurgy*, 2020, vol. 20, no. 3, pp. 5–11. (in Russ.) DOI: 10.14529/met200301
13. Samoiloва O.V., Makrovets L.A. Thermodynamic Modeling of Phase Equilibria in the FeO–MgO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> System. *Materials Science Forum*, 2020, vol. 989, pp. 3–9. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.989.3
14. Kubaschewski O., Alcock C.B. *Metallurgical Thermochemistry*. *Oxford: Pergamon Press Ltd Publ.*, 1979. 392 p.
15. Darken L.S., Gurry R.W. The System Iron–Oxygen. II. Equilibrium and Thermodynamics of Liquid Oxide and Other Phases. *Journal of American Chemical Society*, 1946, vol. 68, pp. 798–816.
16. Samsonov G.V. *Fiziko-khimicheskie svoystva okislov* [Physico-Chemical Properties of Oxides]. *Moscow, Metallurgiya Publ.*, 1969. 456 p.
17. Purt G. Binary System BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. *Radex Rundschau*, 1960, vol. 4, pp. 198–202.
18. Toropov N.A., Galakhov F.Ya. Phase Diagram of the BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> System. *Reports of the USSR Academy of Sciences*, 1952, vol. 82, no. 1, pp. 69–70. (in Russ.)
19. *Critical Melting Points and Reference Data for Vacuum Heat Treating*. Ed. by V. Osterman, H. Antes Jr. *Solar Atmospheres Inc.*, 2010. 42 p.

Received 13 May 2021

## ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Самойлова, О.В. Термодинамическое моделирование диаграммы состояния системы FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / О.В. Самойлова, Л.А. Макровец // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2021. – Т. 21, № 3. – С. 13–19. DOI: 10.14529/met210302

## FOR CITATION

Samoilova O.V., Makrovets L.A. Thermodynamic Modeling of the FeO–BaO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Phase Diagram. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Metallurgy*, 2021, vol. 21, no. 3, pp. 13–19. (in Russ.) DOI: 10.14529/met210302