

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ ОКСИДНЫХ СИСТЕМ FeO–MgO, FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> И FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

*О.В. Самойлова, Л.А. Макроец*

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

Проведено термодинамическое моделирование координат линий ликвидуса диаграмм состояния двойных оксидных систем FeO–MgO, FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и координат поверхности ликвидуса диаграммы состояния тройной оксидной системы FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. В ходе работы определены энергетические параметры теории субрегулярных ионных растворов, используемой при проведении расчета. По результатам проведенного моделирования определены координаты точек невариантных превращений на фазовых диаграммах исследуемых систем. Полученные результаты по термодинамическому моделированию координат линий ликвидуса фазовых диаграмм двойных оксидных систем FeO–MgO, FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> были сопоставлены с разрозненными малочисленными литературными данными для исследуемых систем. По результатам расчета определены энтальпии и энтропии образования соединений FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> и MgCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> из компонентов оксидного расплава систем FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> соответственно. Согласно результатам моделирования энтальпия образования феррохромита из компонентов оксидного расплава составляет 157 376 Дж/моль, а энтропия равняется 44,71 Дж/(моль·К). Энтальпия и энтропия образования магнезиохромита из компонентов оксидного расплава оказались равными 389 100 Дж/моль и 123,19 Дж/(моль·К) соответственно. Впервые получены результаты по расчету координат полной проекции поверхности ликвидуса системы FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Диаграмма состояния системы FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> характеризуется обширными областями равновесия оксидного расплава с твердыми растворами оксидов и с твердыми растворами шпинелей. Результаты, полученные в ходе выполнения настоящей работы, представляют интерес для анализа взаимодействия металлического и шлакового расплавов с футеровкой печи при производстве стали.

*Ключевые слова:* система FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, термодинамическое моделирование, фазовые равновесия.

Изучение фазовых равновесий в системе FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> является одной из актуальных задач при анализе сталеплавильных процессов из-за возможного взаимодействия металлического и шлакового расплавов с футеровкой сталеплавильных печей (состоящей в основном из периклаза или периклазохромита). Результатами такого взаимодействия могут стать загрязнение металла неблагоприятными неметаллическими включениями тугоплавких оксидных соединений, а также изменение технологических (физических) свойств шлака.

Целью настоящей работы является термодинамическое моделирование диаграмм состояния оксидных систем FeO–MgO, FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Используемая в данной работе методика моделирования диаграмм состояния оксидных систем подробно описана в работах [1–4]. В общем случае расчет опирается на наиболее

надёжные экспериментальные данные (из представленных в литературе) о координатах (составе и температуре) характерных точек фазовых диаграмм: точек эвтектических, перитектических, фазовых переходов (например, плавления) и т. п. С использованием этих данных подбираются параметры термодинамической модели, а затем, используя определённые значения параметров, рассчитывается полностью вся линия или поверхность ликвидуса исследуемой системы.

Значения параметров термодинамической модели для описания оксидных систем определяются в процессе решения систем нелинейных уравнений, для чего применяется метод Ньютона. Для составления уравнений используются (как уже говорилось ранее) данные о составах ряда характерных точек, выбранных на линии ликвидуса фазовых диаграмм. Для каждого набора данных составляется выражение, связывающее координаты

характерной точки с параметрами используемой для расчета термодинамической модели.

В табл. 1 приведены необходимые для проведения моделирования данные по температурам и энтальпиям плавления веществ, составляющих систему FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Для расчета координат линий ликвидуса систем FeO–MgO, FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и поверхности ликвидуса системы FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в ходе работы использовалось приближение теории субрегулярных ионных растворов [1]. Для расчета координат линий солидуса, ограничивающих область существования

твердого раствора в системах FeO–MgO и MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, использовалось приближение теории регулярных ионных растворов [1]. Модельные параметры используемых теорий приведены в табл. 2.

Результаты термодинамического моделирования фазовой диаграммы системы FeO–MgO в сравнении с литературными данными [8, 9] приведены на рис. 1. При подборе энергетического параметра теории регулярных ионных растворов и моделировании линии солидуса в системе FeO–MgO учитывались литературные данные [10, 11] по активностям оксида железа

Таблица 1

Данные о температурах и энтальпиях плавления веществ, составляющих систему FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Вещество	$T_m^0, ^\circ\text{C}$	$\Delta_m H_{T_m^0}^0, \text{Дж/моль}$
FeO	1378 [5]	33 470 [6]
MgO	2825 [5]	77 400 [5]
Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2300 [7]	104 670 [7]

Таблица 2

Модельные параметры теории субрегулярных ионных растворов (оксидный расплав) и теории регулярных ионных растворов (твердый раствор)

Система	Оксидный расплав $Q_{ijkl}$ , Дж/моль			Твердый раствор $Q_{12}$ , Дж/моль
FeO–MgO	–5000	–25 000	–15 000	+3000
FeO–Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0	+12 115	–60 565	–
MgO–Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	–2000	–66 580	–26 420	+12 030
FeO–MgO–Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	–35 150	–74 900	–125 470	–

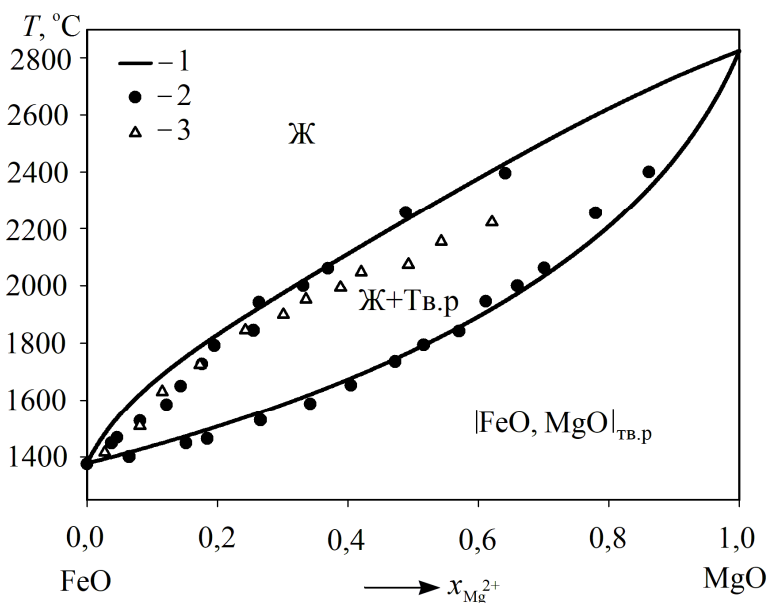


Рис. 1. Фазовая диаграмма системы FeO–MgO: 1 – результаты моделирования; 2 – экспериментальные данные Н. Schenck и W. Pfaff [8]; 3 – экспериментальные данные R. Scheel [9]

и оксида магния в твердом растворе. Согласно этим данным активности оксида железа и оксида магния в твердом растворе  $[\text{FeO}, \text{MgO}]_{\text{тв.р}}$  характеризуются положительными отклонениями от закона Рауля.

Результаты выполненного в ходе настоящей работы расчета активностей компонентов твердого раствора  $[\text{FeO}, \text{MgO}]_{\text{тв.р}}$  по теории регулярных ионных растворов для температур 1400 и 1600 °С приведены на рис. 2. Согласно расчету для выбранных температур активности оксида железа и оксида магния в магнезиовюстите имеют небольшие положительные отклонения от закона Рауля.

Согласно литературным данным [12, 13] в системе  $\text{FeO}-\text{Cr}_2\text{O}_3$  имеется соединение  $\text{FeCr}_2\text{O}_4$  (феррохромит). По данным А. Hoffmann [12], данное соединение плавится инконгруэнтно при температуре порядка 1640 °С, что опровергается в более поздней работе Б.Ф. Белова и др. [13], согласно которой феррохромит имеет конгруэнтный характер плавления при температуре  $2100 \pm 30$  °С.

Результаты проведенного в ходе настоящей работы расчета диаграммы состояния системы  $\text{FeO}-\text{Cr}_2\text{O}_3$  приведены на рис. 3. Координаты точек невариантных равновесий в системе  $\text{FeO}-\text{Cr}_2\text{O}_3$  приведены в табл. 3.

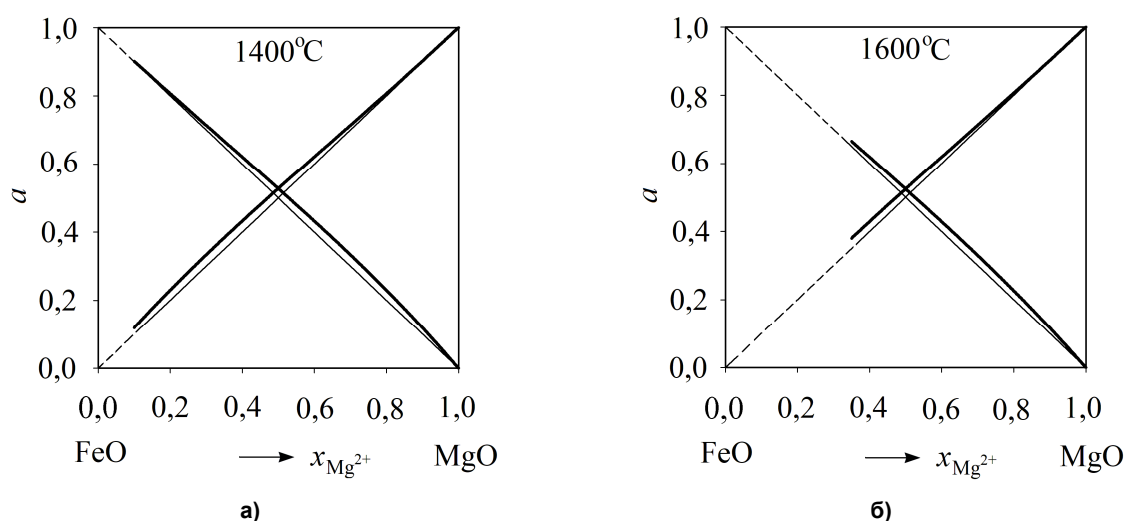


Рис. 2. Результаты расчета активностей компонентов твердого раствора  $[\text{FeO}, \text{MgO}]_{\text{тв.р}}$  для температур (°С): а) 1400; б) 1600

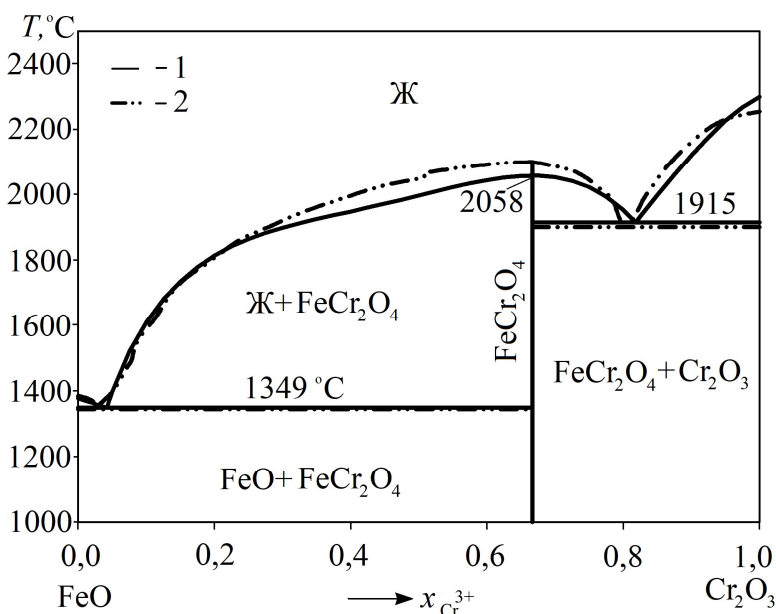


Рис. 3. Фазовая диаграмма системы  $\text{FeO}-\text{Cr}_2\text{O}_3$ : 1 – результаты моделирования; 2 – экспериментальные данные Б.Ф. Белова и др. [13]

Таблица 3

Координаты точек невариантных равновесий в системах FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Равновесие	$x_{Cr^{3+}}$	$T, ^\circ C$
«Ж–FeO–FeCr <sub>2</sub> O <sub>4</sub> »	0,0237 [13]	1345 ± 10 [13]
	0,0420 [наш расчет]	1349 [наш расчет]
«Ж–FeCr <sub>2</sub> O <sub>4</sub> –Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub> »	0,8033 [13]	1900 ± 20 [13]
	0,8180 [наш расчет]	1915 [наш расчет]
«Ж– MgO  <sub>тв.р.</sub> –MgCr <sub>2</sub> O <sub>4</sub> »	0,4962 [14]	2350 [14]
	0,4906 [15]	2340 [15]
	0,4848 [наш расчет]	2340 [наш расчет]
«Ж–MgCr <sub>2</sub> O <sub>4</sub> –Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub> »	0,9151 [15]	2234 [15]
	0,9289 [наш расчет]	2220 [наш расчет]

Температура плавления феррохромита согласно проведенному моделированию составила 2058 °С (см. рис. 3), что удовлетворительно согласуется с данными работы [13]. Согласно результатам моделирования энтальпия образования феррохромита из компонентов оксидного расплава составляет 157 376 Дж/моль, а энтропия равняется 44,71 Дж/(моль·К).

Согласно экспериментальным данным [14] в системе MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> помимо соединения MgCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (магнезиохромит) имеется также твердый раствор на основе оксида магния (рис. 4). Растворимость оксида хрома в твердом оксиде магния по данным [14] при высоких температурах достаточно велика и составляет 47 мас. % Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ( $x_{Cr^{3+}} = 0,3199$ ) при

температуре 2350 °С (см. рис. 4). С другой стороны, по результатам моделирования группы авторов [15] растворимость оксида хрома в твердом оксиде магния не превышает 12,85 мол. % ( $x_{Cr^{3+}} = 0,2277$ ) при температуре 2340 °С (см. рис. 4). Согласно проведенному нами моделированию (см. рис. 4) растворимость оксида хрома в твердом оксиде магния составляет  $x_{Cr^{3+}} = 0,2143$  при 2340 °С.

Координаты точек невариантных равновесий в системе MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> приведены в табл. 3. Литературные данные [14, 15] по температуре плавления соединения MgCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> совпадают и составляют 2397 °С, что было учтено нами при проведении моделирования. Также

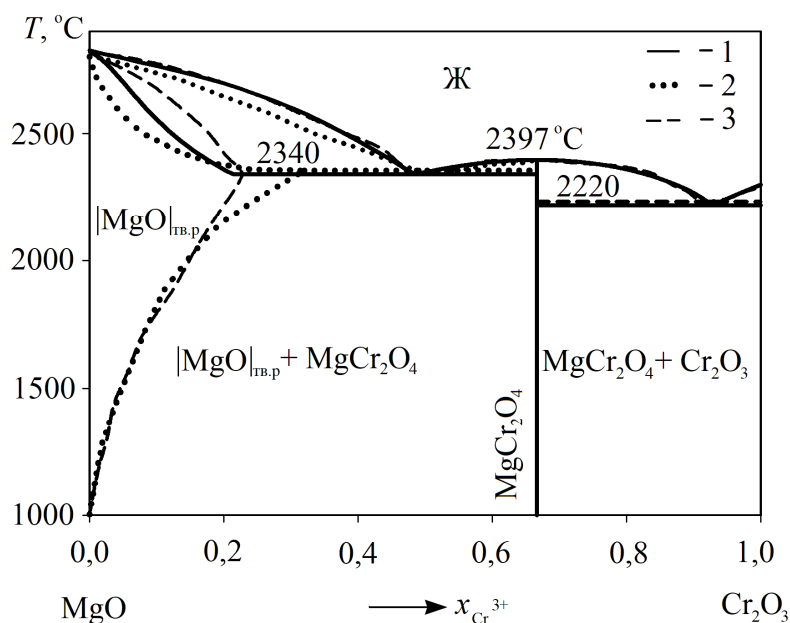


Рис. 4. Фазовая диаграмма системы MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: 1 – результаты моделирования; 2 – экспериментальные данные А.М. Alper и др. [14]; 3 – расчетные данные I.-H. Jung и др. [15]

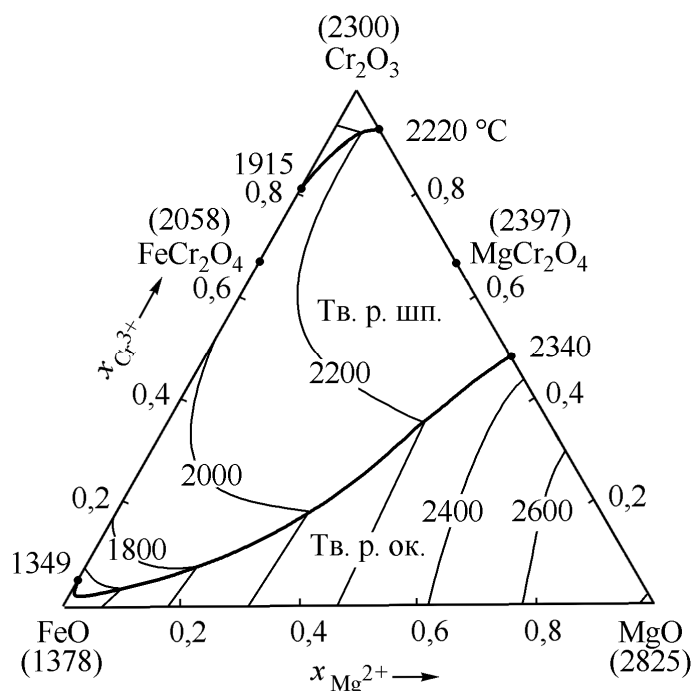


Рис. 5. Фазовая диаграмма системы FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: полная проекция поверхности ликвидуса

методика используемого в данной работе моделирования позволила оценить энтальпию и энтропию образования магнезиохромита из компонентов оксидного расплава, эти величины оказались равными 389100 Дж/моль и 123,19 Дж/(моль·К) соответственно.

Фазовая диаграмма системы FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в литературе изучена частично. Так, известно о наличии непрерывного ряда твердых растворов в псевдобинарной системе FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>–MgCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> [16, 17]. Результаты расчета, выполненного в ходе настоящего исследования, координат полной проекции поверхности ликвидуса диаграммы состояния системы FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> приведены на рис. 5.

На диаграмму (см. рис. 5) нанесены изотермы с шагом в 200 °С в интервале температур от 1600 до 2800 °С. Диаграмма состояния системы FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> характеризуется обширными областями равновесия оксидного расплава с твердыми растворами оксидов (Тв. р. ок.) и с твердыми растворами шпинелей (Тв. р. шп.).

При моделировании фазовых равновесий с участием твердых растворов оксидов в системе FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> принимались во внимание неограниченная растворимость оксида железа в оксиде магния и ограни-

ченная растворимость оксида хрома в оксиде магния.

### Выводы

Проведено термодинамическое моделирование диаграмм состояния оксидных систем FeO–MgO, FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Определены термодинамические модели и их параметры, необходимые для описания фазовых диаграмм исследуемых систем. Полученные результаты по расчету координат линий ликвидуса двойных оксидных систем FeO–MgO, FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> согласуются с литературными данными, что подтверждает применимость алгоритмов моделирования для исследуемых систем. По результатам расчета определены энтальпии и энтропии образования соединений FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> и MgCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> из компонентов оксидного расплава систем FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> соответственно. Впервые получены результаты по расчету координат полной проекции поверхности ликвидуса тройной оксидной системы FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Диаграмма состояния системы FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> характеризуется обширными областями равновесия оксидного расплава с твердыми растворами оксидов и с твердыми растворами шпинелей.

**Литература**

1. Михайлов, Г.Г. Термодинамика металлургических процессов и систем / Г.Г. Михайлов, Б.И. Леонович, Ю.С. Кузнецов. – М.: Издат. Дом МИСиС, 2009. – 520 с.
2. Михайлов, Г.Г. Фазовые равновесия в многокомпонентных системах с жидкими цветными металлами / Г.Г. Михайлов, Е.А. Трофимов, А.Ю. Сидоренко. – М.: Издат. Дом МИСиС, 2014. – 158 с.
3. Термодинамическое моделирование поверхности ликвидус диаграммы состояния системы Si<sub>2</sub>O–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–ZrO<sub>2</sub> / О.В. Самойлова, Г.Г. Михайлов, Л.А. Макровец и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2015. – Т. 15, № 4. – С. 15–21. DOI: 10.14529/met150402
4. Самойлова, О.В. Термодинамическое моделирование фазовой диаграммы системы Si<sub>2</sub>O–Na<sub>2</sub>O–K<sub>2</sub>O / О.В. Самойлова, Л.А. Макровец, Е.А. Трофимов // Вестник Московского университета. Серия 2: Химия. – 2018. – Т. 59, № 3. – С. 196–204.
5. Кубашевский, О. Металлургическая термодинамика / О. Кубашевский, К.Б. Олжокк. – М.: Metallurgia, 1982. – 392 с.
6. 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 the American Chemical Society. – 1946. – Vol. 68. – P. 798–816.
7. Физико-химические свойства окислов. Справочник / под ред. Г.В. Самсонова. – М.: Metallurgia, 1969. – 456 с.
8. Schenck, H. Das System Eisen(II)–oxyd–Magnesiumoxyd und seine Verteilungsgleichgewichte mit flüssigem Eisen bei 1520 bis 1750 °C / H. Schenck, W. Pfaff // Archiv für das Eisenhüttenwesen. – 1961. – Vol. 32, no. 11. – P. 741–751. DOI: 10.1002/srin.196103268
9. Scheel, R. Gleichgewichte im System CaO–MgO–FeO<sub>n</sub> bei Gegenwart von metallischem Eisen / R. Scheel // Sprechsaal für Keramik, Glas, Baustoffe. – 1975. – Vol. 108. – P. 685–686.
10. Prediction of the thermodynamic properties and phase diagrams of silicate systems – evaluation of the FeO–MgO–SiO<sub>2</sub> system / P. Wu, G. Eriksson, A.D. Pelton, M. Blander // ISIJ International. – 1993. – Vol. 33, no. 1. – P. 26–35. DOI: 10.2355/isijinternational.33.26
11. Hasegawa, M. Activity of iron oxide in magnesiowüstite in equilibrium with solid metallic iron / M. Hasegawa, T. Tsukamoto, M. Iwase // Materials Transactions. – 2006. – Vol. 47, no. 3. – P. 854–860.
12. Hoffmann, A. Gleichgewichtsuntersuchungen im System Eisen(II)-oxyd–Chrom(III)-oxyd / A. Hoffmann // Archiv für das Eisenhüttenwesen. – 1965. – Vol. 36, no. 3. – P. 155–162. DOI: 10.1002/srin.196504069
13. Диаграмма фазовых равновесий системы FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / Б.Ф. Белов, И.А. Новохатский, Л.Н. Русаков и др. // Журнал физической химии. – 1968. – Т. XLII, № 7. – С. 1635–1637.
14. Phase equilibria in the system MgO–MgCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> / A.M. Alper, R.N. McNally, R.C. Doman, F.G. Keihn // Journal of The American Ceramic Society. – 1964. – Vol. 47, no. 1. – P. 30–33.
15. Jung, I.-H. Thermodynamic modeling of the MgO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–CrO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system / I.-H. Jung, S. Deckerov, A.D. Pelton // Journal of the American Ceramic Society. – 2005. – Vol. 88, no. 7. – P. 1921–1928. DOI: 10.1111/j.1551-2916.2005.00336.x
16. Phase equilibria and activities of the constituents in FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> spinel solid solution saturated with Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / M. Hino, K. Higuchi, T. Nagasaka, S. Ban-Ya // ISIJ International. – 1994. – Vol. 34, no. 9. – P. 739–745. DOI: 10.2355/isijinternational.34.739
17. Jacob, K.T. Thermodynamics and phase equilibria involving the spinel solid solution Fe<sub>x</sub>Mg<sub>1-x</sub>Cr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> / K.T. Jacob, G.N.K. Iyengar // Metallurgical and Materials Transactions B. – 1999. – Vol. 30B, no. 5. – P. 865–871. DOI: 10.1007/s11663-999-0091-9

**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; [makrovetc@l@susu.ru](mailto:makrovetc@l@susu.ru).

Поступила в редакцию 12 ноября 2018 г.

## THERMODYNAMIC MODELING OF THE PHASE DIAGRAMS OF OXIDE SYSTEMS FeO–MgO, FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> AND FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

O.V. Samoylova, samoilovaov@susu.ru,

L.A. Makrovets, makrovetcla@susu.ru

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

Thermodynamic modeling of the liquidus lines coordinates of the phase diagrams of the FeO–MgO, FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> systems and liquidus surface coordinates of the phase diagram of the FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system was carried out. In the course of the work, the energy parameters of the theory of subregular ionic solutions used in the calculation were determined. According to the results of the simulation, the coordinates of the points of nonvariant transformations on the phase diagrams of the studied systems are determined. The obtained results on thermodynamic modeling of the liquidus lines coordinates of the phase diagrams of the systems FeO–MgO, FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> were compared with scattered literature data for the systems under study. According to the calculation results, the enthalpies and entropies of formation of the compounds FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> and MgCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> from the components of the oxide melt of the FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> systems, respectively, were determined. According to the simulation results, the enthalpy of formation of ferrochromite from the components of the oxide melt is 157 376 J/mol, and the entropy is 44.71 J/(mol·K). The enthalpy and entropy of the formation of magnesiochromite from the components of the oxide melt turned out to be 389 100 J/mol and 123.19 J/(mol·K), respectively. For the first time, results were obtained for calculating the liquidus surface coordinates of the FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system. The phase diagram of the FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system is characterized by extensive equilibrium regions of the oxide melt with solid solutions of oxides and with solid solutions of spinels. The results obtained in the course of this work are of interest for analyzing of the interaction metal and slag with the furnace lining during steelmaking processes.

*Keywords:* FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system, thermodynamic modeling, phase equilibria.

### References

1. 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.)
2. Mikhailov G.G., Trofimov E.A., Sidorenko A.Yu. *Fazovye ravnovesiya v mnogokomponentnykh sistemakh s zhidkimi tsvetnymi metallami* [Phase Equilibria in the Multicomponent Systems with Liquid Non-Ferrous Metals]. Moscow, MISIS Publ., 2014. 158 p. (in Russ.)
3. Samoylova O.V., Mikhailov G.G., Makrovets L.A., Trofimov E.A., Sidorenko A.Yu. Thermodynamic Modeling of Liquidus Surface of the Phase Diagram of Cu<sub>2</sub>O–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–ZrO<sub>2</sub> System. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Metallurgy*, 2015, vol. 15, no. 4, pp. 15–21. (in Russ.) DOI: 10.14529/met150402
4. Samoiloa O.V., Makrovets L.A., Trofimov E.A. Thermodynamic Simulation of the Phase Diagram of the Cu<sub>2</sub>O–Na<sub>2</sub>O–K<sub>2</sub>O System. *Moscow University Chemistry Bulletin*, 2018, vol. 73, no. 3, pp. 105–110. DOI: 10.3103/S0027131418030057
5. Kubaschewski O., Alcock C.B. *Metallurgical Thermochemistry*. Oxford, Pergamon Press Ltd Publ., 1979. 392 p.
6. Darken L.S., Gurry R.W. The System Iron–Oxygen. II. Equilibrium and Thermodynamics of Liquid Oxide and Other Phases. *Journal of the American Chemical Society*, 1946, vol. 68, pp. 798–816.
7. Samsonov G.V. *Fiziko-khimicheskie svoystva okislov* [Physico-Chemical Properties of Oxides]. Moscow, Metallurgiya Publ, 1969. 456 p. (in Russ.)
8. Schenck H., Pfaff W. Das System Eisen(II)–oxyd–Magnesiumoxyd und seine Verteilungsgleichgewichte mit flüssigem Eisen bei 1520 bis 1750 °C. *Archiv für das Eisenhüttenwesen*, 1961, vol. 32, no. 11, pp. 741–751. DOI: 10.1002/srin.196103268

9. Scheel R. Gleichgewichte im System CaO–MgO–FeO<sub>n</sub> bei Gegenwart von metallischem Eisen. *Sprechsaal für Keramik, Glas, Baustoffe*, 1975, vol. 108, pp. 685–686.
10. Wu P., Eriksson G., Pelton A.D., Blander M. Prediction of the Thermodynamic Properties and Phase Diagrams of Silicate Systems – Evaluation of the FeO–MgO–SiO<sub>2</sub> System. *ISIJ International*, 1993, vol. 33, no. 1, pp. 26–35. DOI: 10.2355/isijinternational.33.26
11. Hasegawa M., Tsukamoto T., Iwase M. Activity of Iron Oxide in Magnesiowüstite in Equilibrium with Solid Metallic Iron. *Materials Transactions*, 2006, vol. 47, no. 3, pp. 854–860.
12. Hoffmann A. Gleichgewichtsuntersuchungen im System Eisen(II)-oxyd–Chrom(III)-oxyd. *Archiv für das Eisenhüttenwesen*, 1965, vol. 36, no. 3, pp. 155–162. DOI: 10.1002/srin.196504069
13. Belov B.F., Novohatskiy I.A., Rusakov L.N., Goroh A.V., Savinskaya A.A. Phase Equilibrium Diagram of the FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> System. *Journal of Physical Chemistry*, 1968, vol. XLII, no. 7, pp. 1635–1637.
14. Alper A.M., McNally R.N., Doman R.C., Keihn F.G. Phase Equilibria in the System MgO–MgCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. *Journal of the American Ceramic Society*, 1964, vol. 47, no. 1, pp. 30–33.
15. Jung I.-H., Decterov S., Pelton A.D. Thermodynamic Modeling of the MgO–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–CrO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> System. *Journal of The American Ceramic Society*, 2005, vol. 88, no. 7, pp. 1921–1928. DOI: 10.1111/j.1551-2916.2005.00336.x
16. Hino M., Higuchi K., Nagasaka T., Ban-Ya S. Phase Equilibria and Activities of the Constituents in FeO·Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–MgO·Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Spinel Solid Solution Saturated with Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. *ISIJ International*, 1994, vol. 34, no. 9, pp. 739–745. DOI: 10.2355/isijinternational.34.739
17. Jacob K.T., Iyengar G.N.K. Thermodynamics and Phase Equilibria Involving the Spinel Solid Solution Fe<sub>x</sub>Mg<sub>1-x</sub>Cr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 1999, vol. 30B, no. 5, pp. 865–871. DOI: 10.1007/s11663-999-0091-9

Received 12 November 2018

#### ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Самойлова, О.В. Термодинамическое моделирование фазовых диаграмм оксидных систем FeO–MgO, FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / О.В. Самойлова, Л.А. Макровец // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2019. – Т. 19, № 1. – С. 18–25. DOI: 10.14529/met190102

#### FOR CITATION

Samoylova O.V., Makrovets L.A. Thermodynamic Modeling of the Phase Diagrams of Oxide Systems FeO–MgO, FeO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and FeO–MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Metallurgy*, 2019, vol. 19, no. 1, pp. 18–25. (in Russ.) DOI: 10.14529/met190102