

выбранной расчетной модели. Активационные барьеры обратимого процесса  $B \rightleftharpoons C_+$  полученные из соответствующего анализа многомерной ППЭ составили  $E_1 = 76,6735$  ккал/моль для прямой реакции и  $\Delta E_{-1} = 20,5163$  ккал/моль для обратной реакции.

Литература:

1. Д.Пиментел, О.Мак-Клеллан, Водородная связь, М, Мир, с.195.
2. А.С.Масалимов, Э.М.Ергалиева, А.А.Тур, Р.Р.Рахимов, А.И.Прокофьев, Квантово-химическое исследование механизма реакций протонирования различных молекул 3,6-ди-трет.бутил-2-оксифеноксилем, Вестник Карагандинского университета, серия химия, 2013, №3, с.34-42.
3. A.S.Masalimov, A.F.Kurmanova, S.N.Nikolskiy, A.U.Ospanov, A.A.Tur, EPR spectroscopy of the fast proton exchange reactions in solutions, Karaganda University Bull., Series Chemistry.-2014.-P.30-35.-№ 1.
4. J.B. Foresman, A.Frish, Exploring Chemistry with Electronic Structures Methods. Second Edition, 1996, Gaussian Inc., Pittsburg, p. 302
5. J.A. Weil, J.R. Bolton, Electron Paramagnetic Resonance, Elementary Theory and Applications, John Wiley & Sons, New York, 2007.

## ИЗУЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СПЕКАНИЯ УГЛЕЙ МЕСТОРОЖДЕНИЯ «САРЫАДЫР» ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КАРБИДОСОДЕРЖАЩЕГО ПОЛУПРОДУКТА

Махамбетов Е.Н., магистрант\*; Байсанов С.О., д.т.н., профессор, зав. лабораторией «Металлургических расплавов»\*\*; Байсанов А.С., к.т.н., зав. лабораторией «Пирометаллургических процессов»\*\*; Шайржанов А.Ж., ведущий инженер лаб. «Металлургических расплавов»\*\*

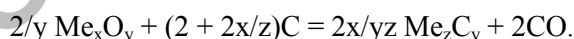
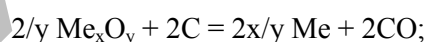
\*Карагандинский государственный индустриальный университет

г. Темиртау, Республика Казахстан;

\*\*Химико-металлургический институт им. Ж. Абишева

г. Караганда, Республика Казахстан

В производстве ферросплавов в качестве восстановителя широко применяется углерод. Углетермический способ выплавки ферросплавов считается наиболее экономичным и таким способом производится наибольшее количество ферросплавов [1]. Как известно сродство углерода к кислороду с ростом температуры возрастает, поэтому при высоких температурах углеродом могут быть восстановлены практически все элементы из их оксидов. В общем виде суммарные реакции восстановления оксидов углеродом могут быть представлены следующими уравнениями [2]:



При выплавке ферросплавов в электропечах применяются углеродистые материалы, как естественного происхождения, так и искусственно приготовленные, а также смесь из нескольких видов восстановителей. Назначение углеродистых материалов также бывает разным, в большинстве случаев они применяются для восстановления металлов из их оксидов, а также как добавка, способствующая увеличению электросопротивления ванны, разрыхлению колошника и повышению его газопроницаемости.

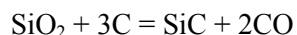
Углеродистые восстановители различают по способу их производства, видам применяемых углей, конечной температуре их обработки и др. Наибольшее распространение в электротермии ферросплавов получили такие восстановители как: коксик-орешек различных заводов, полукокс, каменные и бурые угли, антрацит. Нефтяной кокс и древесный уголь применяют в тех случаях, когда в восстановителе требуется минимальное количество вредных примесей [3].

При этом единственным центром добычи ценных коксующихся углей в Республике Казахстан является Карагандинский бассейн [4]. В связи с отсутствием в бассейне запасов коксующихся углей, пригодных для открытой разработки, особую актуальность имеет вопрос вовлечения углей других месторождений в металлургический передел.

Целью работы является получение карбидосодержащего полупродукта из высокозольных углей месторождения «Сарыадыр» путем термообработки для частичной замены углесодержащих восстановителей при выплавке кремнистых ферросплавов.

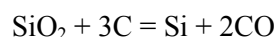
В электрометаллургии кремния и кремнистых ферросплавов карбид кремния (карборунд) представляет интерес как промежуточный продукт, в сложном физико-химическом процессе выплавки кремния технической чистоты, силикокальция, ферросилиция и др. Знание особенностей процесса его получения полезно для совершенствования технологии выплавки ферросплавов путем применения отходов смежных производств, содержащих карбид (SiC), в качестве шихтовых материалов.

Образование карбида кремния протекает по реакции восстановления оксида кремния (SiO<sub>2</sub>) твердым углеродом (C) до образования SiC. Процесс в общем виде может быть представлен реакцией:



При выплавке кремнистых ферросплавов реакция восстановления оксида кремния идет через образование карбида кремния.

Балансовая реакция, характеризующая процесс восстановления SiO<sub>2</sub> углеродом при выплавке кремнистых сплавов, может быть представлена в следующем виде:

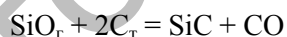


Однако реально процесс восстановления SiO<sub>2</sub> углеродом при различных температурах протекает через стадии образования промежуточных продуктов SiO<sub>r</sub> и SiC, которые необходимо учитывать при термодинамическом анализе для правильного прогнозирования параметров технологии выплавки кремнийсодержащих ферросплавов [1].

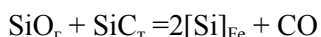
Восстановление SiO<sub>2</sub> углеродом до SiO<sub>r</sub> описывается реакцией:



Взаимодействие SiO<sub>r</sub> с углеродом приводит к получению SiC<sub>r</sub> по реакции:



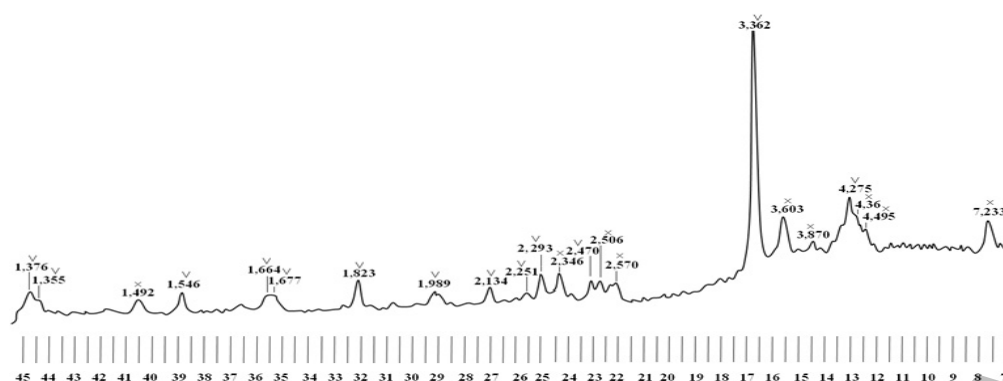
Взаимодействие газообразного монооксида SiO<sub>r</sub> с твердым SiC<sub>r</sub> приводит к получению кремния, который в дальнейшем растворяется в железе:



Таким образом, анализ протекающих реакций при выплавке кремнистых ферросплавов, показывает возможность замены традиционных углеродистых восстановителей на карбидосодержащий полупродукт. В полупродукте содержится твердый углерод и карбид кремния. Углерод карбидосодержащего полупродукта идет на восстановление оксидной части шихты, карбид кремния выступает в качестве промежуточного полупродукта как видно из реакции (5).

Высокозольный уголь месторождения «Сарыадыр» зольностью 45-55% является уникальным материалом и представляет собой природную смесь твердого углерода, оксидов кремния и алюминия. Минеральная составляющая пород на 92-94% состоит из оксидов кремния, алюминия и железа, причем сумма оксидов кремния и алюминия не менее 90-95%. Содержание SiO<sub>2</sub> и Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в зольной части находится в пределах 55-65% и 30-35%, соответственно. Содержания углерода в зависимости от зольности, составляет 38-51% при содержании до 22% летучих соединений.

С целью изучения фазового состава исходного материала (угля месторождения «Сарыадыр») проведен рентгенофазовый анализ на установке ДРОН-2. В результате установлено, что основные фазы угля представлены в виде группы каолинитов (Al<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>5</sub>(OH)<sub>4</sub>), таких как: накрит (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>·2SiO<sub>2</sub>·2H<sub>2</sub>O), диккит (Al<sub>4</sub>(Si<sub>4</sub>O<sub>10</sub>)(OH)<sub>8</sub>) и обнаружена фаза кварца α-SiO<sub>2</sub>. Рентгенограмма исследуемого угля изображена на рисунке 1.



v – кварц  $\alpha$ - $\text{SiO}_2$  (1,376; 1,355; 1,492; 1,546; 1,664; 1,677; 1,823; 1,989; 2,134; 2,251; 2,293; 2,470; 3,362; 4,275.) × – каолинит  $\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_2$  (1,492; 2,346; 2,506; 2,570; 3,603; 3,870; 4,36; 4,495; 7,233.)

Рисунок 1 – Рентгенограмма угля месторождения «Сарыадыр»

Схожим с предлагаемым способом является процесс получения карбида кремния. В традиционной технологии получения карбида кремния источником кремния является кварцевый песок, а карборунд получают путем восстановления оксида кремния ( $\text{SiO}_2$ ) углеродом.

Анализируя данные физико-химических исследований исходного материала можно утверждать, что из высокзолыного угля месторождения «Сарыадыр» можно получить карбидосодержащий полупродукт состоящий в основном из твердого углерода и карбида кремния.

В условиях Химико-металлургического института, провели исследования на высокотемпературной лабораторной установке при температуре 1650 С и выдержкой в течение 40 мин. Температуру установили выше теоритической, с учетом того что нагрев осуществлялся косвенным образом. Исходная фракция материала 3 – 5мм, масса навески 167 г. В ходе исследования использовали графитовый тигель с засыпка порошком графита для предотвращения окисления углерода в угле и потерь субоксидов кремния. Замер температуры осуществлялся вольфрам-рениевой термопарой.

После термообработки получили слабо спекшийся продукт. Уголь не плавиться и в процессе нагревания переходит в пластическое состояние. В результате термического распада угольного вещества образуются новые соединения, которые и создают жидкую пластическую фазу. Переход угля через стадию пластического состояния – основа превращения отдельных его частиц в более или менее однородную массу.

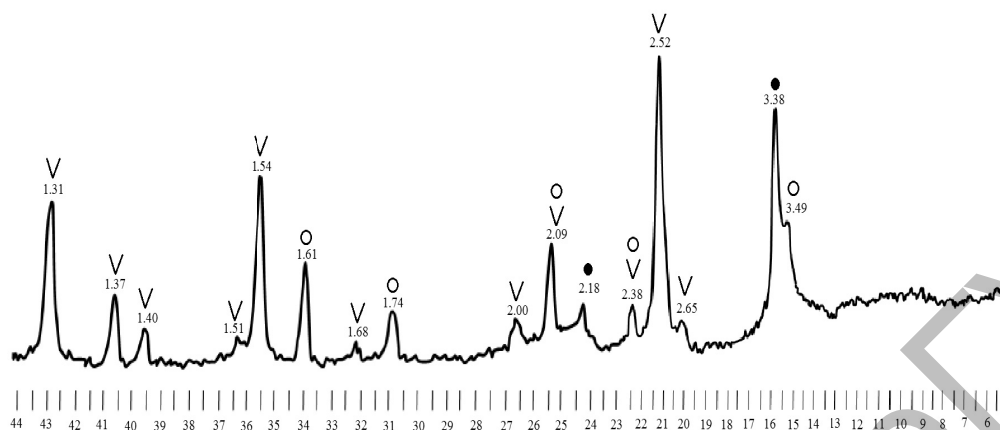
Полученный продукт серого оттенка, в котором предположительно образовался карбид кремния в ходе восстановления оксидов кремния и алюминия. Для визуального сравнения угля до и после термообработки ниже представлен рисунок №2.



Рисунок 2 - Уголь сарыадырский до (а) и после (б) термообработки при температуре 1650°С

Для определения фазового состава термообработанного угля провели рентгенофазовый анализ на установке ДРОН-2. Фазовый анализ термообработанного угля выявил следующие фазы: карбид кремния  $\text{SiC}$ , корунд  $\alpha$  -  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , силлиманит соединение оксида алюминия и кремния  $(\text{Al}_2\text{O}_3) \cdot (\text{SiO}_2)$ . По литературным данным силлиманит содержит  $(\text{Al}_2\text{O}_3)$  - 63,1% и  $(\text{SiO}_2)$  - 36,9%. Как видно по

рентгенограмме можно отметить, что основным составляющим полупродукта является карбид кремния, ряд ярко выраженных пиков.



V – карбид кремния SiC (1,31; 1,37; 1,40; 1,51; 1,54; 1,68; 2,00; 2,09; 2,38; 2,52; 2,65.), ●  
 силлиманит  $Al_2O_3 \cdot SiO_2$  (2,18; 3,38)  
 ○ - корунд  $\alpha$   $Al_2O_3$  (1,61; 1,74; 2,09; 2,38; 3,49.)

Рисунок 3 – Рентгенограмма термообработанного угля

На основе проведенных исследований по термообработке угля месторождения угля «Сарыадыр» можно сделать вывод:

- рентгенофазовый анализ высокозольного месторождения угля «Сарыадыр» показал, что уголь в основном состоит из твердого углерода, оксид кремния ( $SiO_2$ ) и алюминия ( $Al_2O_3$ ).

- фазовый состав термообработанного угля - карбидосодержащего полупродукта определил, что полупродукт состоит из карбида кремния (SiC) причем с высокой долей, а также были замечаны силлиманит ( $Al_2O_3$ ) ( $SiO_2$ ) соединение оксида алюминия и кремния и корунд ( $\alpha$ - $Al_2O_3$ ).

В целом по результатам исследований были достигнуты поставленные задачи по получению карбидосодержащего полупродукта путем высокотемпературного спекания угля при  $1650^\circ C$  месторождения «Сарыадыр».

#### Литература:

1. Рысс М.А. Производство ферросплавов. - М.: Металлургия, 1985. - 344 с.
2. Гасик М.И., Лякишев Н.П., Емлин Б.И. Теория и технология производства ферросплавов. - М.: Металлургия, 1988. - 784 с.
3. Мизин В.Г., Серов Г.В. Углеродистые восстановители для ферросплавов. - М.: Металлургия, 1976. - 272 с.
4. Бдырыс С.С. Угольная отрасль - один из базовых секторов экономики Республики Казахстан // Вестник КарГУ. – 2007. – №4. – С. 20-24.

## НАПРАВЛЕННЫЙ СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ГЕТЕРОАТОМСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ ЭСТАФИАТИНА

Мерхатулы Н., д.х.н., профессор; Абеуова С.Б., докторант PhD;  
 Омарова А.Т., магистр преподаватель; Наушабекова Д.Д., магистрант;  
 Ибраева А.К., магистрант

Карагандинский государственный университет им. академика Е.А.Букетова  
 г. Караганда, Республика Казахстан

В данной работе рассмотрены подходы к направленному синтезу практически значимых производных гваянолида эстафиатина. Показано, что наличие в молекуле эстафиатина  $\alpha$ -эпоксидного цикла определяет стерео- и региоселективность нуклеофильного присоединения и получения новых биологически активных производных. Обсуждаемый в данной работе сесквитерпеновый лактон эстафиатин и его производные были изучены в плане получения новых биологически активных веществ и влияние структурных особенностей