МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА МЕТАЛУРГІЙНА АКАДЕМІЯ УКРАЇНИ

СНІГУРА ІРИНА РОМАНІВНА

УДК 669.17.046.517В.083.133

РОЗРОБКА КРИТЕРІЇВ ТА КОМПЛЕКСНИХ ПОКАЗНИКІВ ДЛЯ ОПИСУ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ВЗАЄМОДІЙ В СИСТЕМІ «МЕТАЛ-ШЛАК» ПРИ ПОЗАПІЧНІЙ ОБРОБЦІ СТАЛІ

Спеціальність 05.16.02 – Металургія чорних і
кольорових металів та спеціальних сплавів

АВТОРЕФЕРАТ
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

Дніпро – 2021

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті чорної металургії ім. З.І. Некрасова Національної академії наук України, м. Дніпро.

Науковий керівник: доктор технічних наук, професор
Тогобицька Дар'я Миколаївна,
Інститут чорної металургії
ім. З. І. Некрасова НАН України,
зав. відділу фізико-хімічних проблем
металургійних процесів,
м. Дніпро

Офіційні опоненти: доктор технічних наук, професор
Макуров Сергій Леонідович
ДВНЗ Приазовський державний технічний
університет, зав. кафедри теорії металургійних
процесів і ливарного виробництва
м. Маріуполь

кандидат технічних наук
Чубін Костянтин Іванович
Дніпровський державний технічний університет,
доцент кафедри металургії чорних металів
м. Кам'янське

Захист відбудеться «27» квітня 2021 р. о 11-00 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 08.084.03 Національної металургійної академії України за адресою: 49600, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 4.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Національної металургійної академії України за адресою: 49600, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 4.

Автореферат розісланий «22» березня 2021 р.

Вчений секретар спеціалізованої
вченої ради Д 08.084.03
доктор технічних наук, професор Л.В. Камкіна
E-mail: lydmila_kamkina@ukr.net

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність. Металургійна галузь є однією з найважливіших ланок у економіці України, виконуючи істотну роль у вирішенні питань задоволення невпинно зростаючих потреб споживачів з якісної, конкурентоздатної металопродукції для будівництва, авіації, транспортного та важкого машинобудування, електротехніки та ін. Однак, сучасний стан світової металургійної промисловості зазнає значних змін як в економічному аспекті, так і в сировинному забезпеченні (виснаження і погіршення якості мінерально-сировинних запасів), що ініціює пошук і розробку принципово нових технологічних схем виробництва якісної металопродукції з урахуванням підвищення їх корисності і ресурсозбереження.

Резервним потенціалом у вирішенні поставлених завдань виступає позапічна обробка сталі як технологічний фактор впливу у поєднанні з зусиллями феросплавної галузі, яка дозволяє розширити номенклатуру сировини, що використовується, за допомогою відповідного поєднання легуючих елементів, використанням вторинної сировини, удосконаленням технологічних прийомів введення добавок з метою отримання максимально можливого ступеня засвоєння їх провідного елементу і спрямованого формування властивостей сталей і сплавів спеціального призначення. Як показує промислова практика, значна кількість добавок, що вводяться, не повноцінно використовується, є значні їх втрати у вигляді шлаку або з газовою фазою, а також здійснюється скачування шлакової фази до моменту завершення її максимальної термодинамічної можливості поглинання шкідливих домішок (сірки і фосфору та інших).

У зв'язку з цим важливими і актуальними стають дослідження, спрямовані на розробку нових підходів, впровадження неординарних технологічних прийомів отримання якісно нових фізико-хімічних характеристик сталей, економічно виправданого використання легуючих, модифікуючих, рафінуючих добавок з урахуванням вирішення питань екологічності виробництва та залученням сучасних інформаційних технологій.

Зв’язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Робота виконана у відповідності з тематичними планами науково-дослідних робіт Інституту чорної металургії ім. З.І. Некрасова НАН України. Дослідження дисертаційної роботи проведені в рамках держбюджетних академічних робіт: «Розвиток наукових уявлень про структурний стан шлакових розплавів для обґрунтованого вибору їх хімічного складу, що забезпечить ефективність процесу рафінування при виробництві чавуну і сталі» № державної реєстрації: 0118U000079 і «Розробка критеріїв та методики прогнозування фізико-хімічних та теплофізичних властивостей феросплавів з метою їх ефективного використання при виробництві сталі» № державної реєстрації: 0115U001062 та програми «Розвиток наукових уявлень про процеси ковшової обробки сталі з урахуванням порційного вводу добавок і особливостей перемішування та теплового стану при дегазації металу» № державної реєстрації: 0118U000081, в яких автор приймала участь у якості відповідального виконавця при виконанні наукових досліджень,

дослідно-промисловому та промисловому впровадженні нових підходів до оптимізації процесів позапічного доведення сталі.

Мета і завдання дослідження. Метою роботи є розробка комплексних показників фізико-хімічних і теплофізичних властивостей металевих, шлакових розплавів і добавок та оцінка їх впливу на розподіл елементів при доведенні сталі на установці ківш-піч (УКП) та способів науково - обґрунтованого вибору раціонального складу добавок для максимального їх засвоєння, підвищення ефективності управління режимом доводки сталі і техніко-економічних показників процесу.

Для досягнення зазначеної мети необхідно вирішити такі основні завдання:

– Виконати аналіз існуючих теорій, основних моделей і концепцій будови металевих та шлакових розплавів та обґрунтувати вибір моделі їх структури для прогнозування технологічних і фізико-хімічних властивостей розплавів сталеплавильного виробництва та сучасних уявлень поведінки, розподілу, засвоєння та втрати добавок при позапічній обробці сталі;

– Актуалізувати бази експериментальних даних банку даних «Металургія» про властивості металевих, шлакових розплавів і добавок на основі фундаментальних експериментальних, промислових даних та даних літературного пошуку (статті, патенти, винаходи, наукові розробки, монографії);

– Встановити залежності взаємного впливу компонентів сталі та шлаку з позиції кооперативної іонообмінної взаємодії розплавів, як хімічно єдиних систем на розподіл елементів у системі «метал-шлак»;

– Обґрунтувати вибір критеріїв, які найкращим чином відображають умови максимально можливого переходу кремнію та марганцю у метал; сірки та фосфору в шлак в сучасних умовах роботи сталеплавильного виробництва;

– Розробити комплексні показники та методику для прогнозування складу сталі та оцінки ефективності розподілу елементів між металевою і шлаковою фазами на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку;

– Розробити рекомендації щодо поліпшення засвоєння добавок з метою підвищення якості металопродукції зі сталі в конкретних шихтових і технологічних умовах.

Об’єкт дослідження – фізико-хімічні властивості металевих та шлакових розплавів сталеплавильного виробництва при доведенні на УКП.

Предмет дослідження – закономірності впливу компонентів хімічного складу сталі та шлаку, технологічних параметрів плавки на ефективність засвоєння легуючих та рафінуючих добавок.

Методи досліджень: Для вирішення поставлених завдань в роботі використані сучасні методи досліджень, у тому числі аналіз існуючих теорій, моделей і концепцій будови металевих та шлакових розплавів; аналітичні дослідження закономірностей розподілу легуючих добавок при позапічній обробці сталі; моделювання і прогнозування фізико-хімічних та теплофізичних властивостей металевих та шлакових розплавів на основі сучасних інформаційних технологій; розрахунково-аналітичне дослідження закономірностей впливу компонентів металевого та шлакового розплавів і технологічних параметрів плавки на ступінь засвоєння легуючих й рафінуючих добавок. Визначення параметрів

міжатомної взаємодії у металевих та шлакових розплавах виконано в середовищах програмних комплексів «Metal» та «Шлак». Досліджувану вибірку даних обробляли з використанням програм статистичного аналізу з побудовою графічних залежностей в програмі EXCEL та трьохвимірних об'ємних картограм.

Наукова новизна одержаних результатів пов'язана з розробкою нового наукового підходу до оцінки засвоєння легуючих, рафінуючих добавок у системі «метал-шлак» при доведенні на УКП. На відміну від відомих методів, де враховуються тільки балансові співвідношення між початково введеним та кінцевим вмістом добавки, запропонована методика ґрунтується на врахуванні фізико-хімічних властивостей металу, шлаку, добавки та їх комплексних співвідношень у поєднанні з параметрами впливу технології та техніко-економічними показниками процесів позапічного доведення сталі.

1. Вперше запропоновано новий критерій мікронеоднорідності металевого розплаву - ρ_l, який пояснює вплив спрямованої зарядової щільності на формування мікрокомплексів на рівні міжатомної взаємодії. Показано зв'язок параметру мікронеоднорідної будови з властивостями металургійних розплавів, який дозволяє здійснювати підбір добавок з максимально можливим ступенем засвоєння та реагуючої здатності.

2. Науково-обґрунтована інформативність параметру $tg\alpha$, який характеризує зміну іонного радіусу елемента від його заряду та хімічну активність в металевому розплаві, що підтверджує доцільність його урахування при розрахунку розподілу елементів у системі «метал-шлак».

3. Вперше виявлені закономірності впливу параметрів міжатомної взаємодії (ρ_l, $tg\alpha$) наряду з Z^Y, d - на комплекс фізико-хімічних та теплофізичних властивостей, на основі яких розроблені аналітичні залежності для широкого сортаментного ряду сталей (хромонікелевих, інструментальних, конструкційних, рельсових, підшипникових, алюмінієвих, магнієвих та жароміцних нікелевих сплавів) та феросплавів вітчизняного виробництва ($R^2 \geq 0{,}95$). Використання отриманих залежностей дозволяє визначити вибір раціональних добавок феросплавів з відповідним співвідношенням властивостей розплавів з метою спрямованого формування процесу доведення при виробництві високоякісної сталі.

4. Вперше з використанням інтегральних фізико-хімічних параметрів розплавів та технологічних показників виконано моделювання процесів взаємодії в системі «метал-шлак» при доведенні сталі на УКП, що дало змогу розробити новий підхід до прогнозування розподілу елементів, який дозволяє провести оцінку ступеня завершеності процесів рафінування і легування та обґрунтовано здійснити вибір керуючих дій для своєчасного коригування складу і масового співвідношення компонентів шихти з метою отримання металу оптимального складу в конкретних шихтових і технологічних умовах.

Практичне значення мають наступні одержані результати:

1. Актуалізовані бази фундаментальних даних про властивості металевих розплавів (БД «Метал»), феросплавів (БД «Феросплави») і результатів процесів взаємодії та розподілу елементів в системі «метал-шлак» (БД «Метал-шлак-газ)

2. Алгоритми для прогнозування комплексу фізико-хімічних (температур плавлення та кристалізації, в'язкості, щільності) та теплофізичних (теплоємність, теплопровідність) властивостей металургійних розплавів (феросплавів, сталі) з точністю $R^2 \geq 0{,}95$.

3. Метод оперативної оцінки коефіцієнтів розподілу добавок заснований на взаємозв'язку інформативних показників компонентів вихідних розплавів сталі, шлаку, добавок і комплексних співвідношень їх фізико-хімічних, теплофізичних властивостей з урахуванням виявлених закономірностей формування розплавів.

4. Методика вибору хімічного складу сталі в рамках діапазонів регламентованих ГОСТом, який забезпечує стабілізацію механічних властивостей металопродукції на раціональному рівні (№ 70524 від 20.02.2017), суть якої полягає у введенні в зв'язок між складом і властивостями розплавів проміжної ланки - комплексу інтегральних модельних параметрів міжатомної взаємодії, що характеризують хімічний і структурний стан дослідного матеріалу.

5. Патент на винахід. «Сталерозливний ківш для позапічної обробки металу» (122852 С2). У результаті якого за рахунок удосконалення розташування продувочної фурми у днищі ковша організовано ефективне перемішування металу за рахунок зниження об'єму застійних зон у ванні ковша на 12,5%, зменшено перегрів металу на 17,7% та підвищена стійкість футерівки на 5 плавок, що забезпечило відповідний економічний ефект на виробництві.

6. Основні положення роботи впроваджено у навчальний процес при викладанні дисциплін на кафедрі ТМП і ЗХ у Національній металургійній академії України за спеціальністю 05.16.02 – «Металургія чорних і кольорових металів та спеціальних сплавів».

Особистий внесок здобувача. Представлені в дисертаційній роботі аналітичний огляд, дослідження, обробка та аналіз результатів [12], наукове обґрунтування основних положень, технологічні розробки [14, 15] і їх реалізація в промислових умовах виконані особисто дисертантом при консультаційній допомозі наукового керівника. В опублікованих наукових працях, написаних дисертантом у співавторстві, особистий внесок здобувача полягає в аналізі та узагальненні інформації про сучасні уявлення поведінки, розподілу і засвоєння легуючих добавок при позапічній обробці сталі [5, 6, 13]; обґрунтуванні вибору моделі будови металевих та шлакових розплавів [1, 3]; розробці моделей для прогнозування фізико-хімічних та теплофізичних властивостей металевих та шлакових розплавів [2, 4, 8]; виконанні розрахунково-аналітичної оцінки розподілу добавок при позапічній обробці сталі [7, 11]; розробці критерію оцінки ефективності засвоєння та розподілу легуючих елементів в системі метал-шлак [9, 10]. Представлені в дисертаційній роботі аналітичний огляд, дослідження, обробка та аналіз результатів, наукове обґрунтування основних положень, технологічні розробки і їх реалізація в промислових умовах виконані особисто дисертантом при консультаційній допомозі наукового керівника. В опублікованих наукових працях, написаних дисертантом у співавторстві, особистий внесок здобувача полягає в аналізі та узагальненні інформації про сучасні уявлення поведінки, розподілу і засвоєння легуючих добавок при позапічній обробці сталі; обґрунтуванні вибору моделі будови металевих та шлакових розплавів; розробці моделей для

прогнозування фізико-хімічних та теплофізичних властивостей металевих та шлакових розплавів; виконанні розрахунково-аналітичної оцінки розподілу добавок при позапічній обробці сталі; розробці критерію оцінки ефективності засвоєння та розподілу легуючих елементів в системі метал-шлак.

Апробація результатів дисертації. Основні положення і результати дисертаційної роботи повідомлені на: Міжнародній науково-технічній конференції серед молоді ПАТ «Запоріжсталь» (Запоріжжя, 2016); IX International conference of young scientists on welding and related technologies (Kyiv, 2017); VII Міжнародній науково-практичній конференції «Наука в сучасному світі» (Київ, 2016); Молодіжній науково-практичній конференції «Молода академія» (Дніпропетровськ, 2016); Міжнародних науково-практичних конференціях «Лиття. Металургія» (Запоріжжя, 2016 – 2020); Міжнародних науково-технічних конференціях «Інформаційні технології в металургії та машинобудуванні» (Дніпро, 2017, 2019); Всеукраїнській науково-методичній конференції «Проблеми математичного моделювання» (Кам'янське, 2017); I та II Всеукраїнських науково-технічних конференціях молодих вчених «НАУКА І МЕТАЛУРГІЯ» (Дніпро, 2017, 2018); Міжнародних науково-технічних конференціях «Університетська наука» (Маріуполь, 2017 – 2020); Міжнародній науковій конференції «Матеріали для роботи в екстремальних умовах» (Київ, 2018); XVI Всеукраїнській науково-практичній конференції Спеціальна Металургія: Вчора, сьогодні, завтра (Дніпро, 2018); XX Міжнародній науково-технічній конференції «Інформаційні технології в металургії та машинобудуванні» (Дніпро, 2020).

Публікації. За темою дисертації опубліковано 15 наукових робіт: 5 статей [2-6] у фахових наукових виданнях, згідно з вимогами Департаменту атестації кадрів МОН України, 1 стаття [1] в іноземних виданнях та опублікована в наукометричній базі даних «Scopus», 1 свідоцтво на авторське право [14], 1 патент України на винахід [15] і 7 статей [7-13] опубліковані в матеріалах наукових конференцій.

Структура і обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається з вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел та додатку. Загальний обсяг роботи включає 166 сторінок, в тому числі 48 малюнків, 23 таблиці, 173 найменування використаних джерел, 1 додаток.

Автор висловлює щиру подяку за проведення спільних досліджень фахівцям відділу фізико-хімічних проблем металургійних процесів та фізико-технічних проблем металургії сталі Інституту чорної металургії ім. З.І. Некрасова НАН України.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

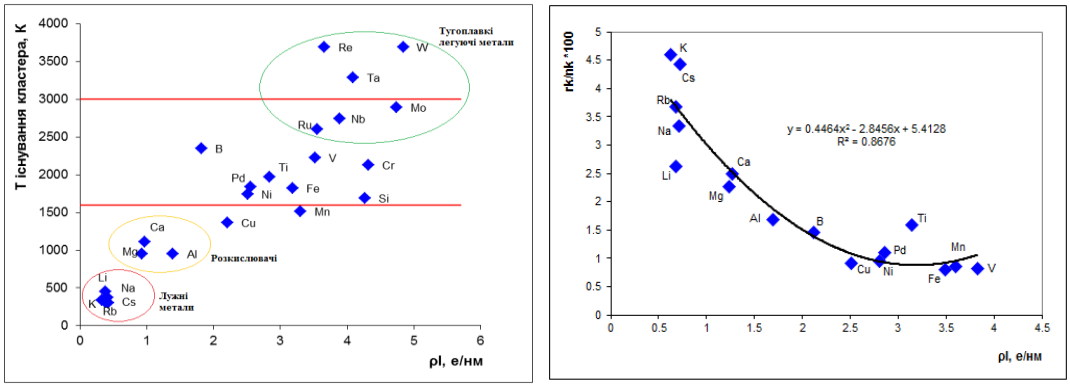
У вступі обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано цілі та задачі дослідження, висвітлені наукова новизна і практичне значення одержаних результатів, відзначено особистий внесок автора, наведені дані по апробації розробок та публікаціях результатів досліджень.

У першому розділі «Вибір моделей будови розплавів металу та шлаку» виконаний аналіз сучасних уявлень та відображена еволюційна зміна поглядів провідних дослідних шкіл щодо будови металевих та шлакових розплавів. Особливу роль у розвиток розуміння природи металевих розплавів заклали напрацювання Фішера І.З., Френкеля Я. І., Островського О. І., Григоряна В. А., Самаріна А.М., Новохатського І.А., а шлакових систем – Шенка Г., Кожеурова В.І., Єсіна О.А., Пономаренко А.Г., Приходько Е.В. та ін. Проведений аналіз показав, що не дивлячись на велику кількість досліджень, присвячених металургійним розплавам, все ще залишається дискусійним питання про їх структурні зміни і будову, що пов’язано з значною кількістю підходів, концепцій, моделей та їх обмеженнями, прийнятими при описі, а отже розрізненістю думок щодо інтерпретації поняття «будови металевих та шлакових розплавів». На сьогоднішній день немає сформульованих фундаментальних положень рідкого стану як для металевих, так і для шлакових систем, які послужили б основою для формування загальноприйнятих моделей, що ускладнює опис реальних розплавів в нерозривному ланцюзі «склад - структура - властивості» в системах «метал-шлак». Оскільки у сталеплавильному виробництві метал та шлак обов'язково проходять через стадію рідкого стану, значимість якого у спрямованому формуванні властивостей кінцевого продукту, як показує практика, досить велика, виникає нагальна необхідність в обґрунтуванні фізико-хімічних властивостей металевих та шлакових розплавів, механізму хімічних перетворень, протіканні основних термодинамічних взаємодій, що відбуваються у системі «метал – шлак – добавка» і встановленні закономірностей при формуванні фаз з метою прогнозування результатів їх взаємодій. Виходячи з цього, у роботі обґрунтований вибір концепції спрямованого хімічного зв’язку, розробленої Приходько Е.В. для моделювання процесів міжатомної взаємодії між металевим та шлаковим розплавами, ядром якої є система рівнянь неполяризованих іонних радіусів (СНІР). Особливість застосування такого методу полягає у зниженні факторного навантаження на модель, що досягається за рахунок процедури «згортки» хімічного складу багатокомпонентних систем у параметрах міжатомної взаємодії. Базовою складовою системного підходу до вирішення задач направленого формування сталей заданої якості є розгляд багатокомпонентного розплаву як хімічно єдиної системи, яка враховує вклад кожного компоненту та всі варіативні можливості попарної його взаємодії, у тому числі компонентів в малих концентраційних їх долях. Показано, що у розрахункових моделях, виробничій практиці і в значній кількості програмних комплексів, спрямованих на оцінку ступеня засвоєння добавок, закладені лише балансові співвідношення мас між початково введеною її кількістю і кінцевим вмістом в сталі, виміряним за даними хімічного аналізу. У якості альтернативного підходу до оцінки ступеню засвоєння та вирішення задач

моделювання закономірностей розподілу добавок відмічена важливість врахування процесів міжатомної взаємодії у розплавах та показників сил зв'язків різних пар атомів.

З метою створення інформаційної основи для формування репрезентативних вибірок даних, націлених на вирішення задач прогнозування властивостей металевих та шлакових розплавів і результатів їх взаємодії, актуалізовані наявні в ІЧМ бази даних «Шлак», «Метал», «Феросплави» сучасними фундаментальними експериментальними даними (фізико-хімічні, теплофізичні і т.д.) розплавів, власними та поточними промисловими експериментальними даними. Таким чином, на підставі інформаційно-аналітичного огляду з урахуванням сучасних тенденцій розвитку металургійної галузі країни обґрунтована актуальність проведення досліджень по розробці критеріїв та формулювання методики для оцінки ефективності протікання процесів рафінування і доведення сталі при позапічній її обробці.

У другому розділі «Прогнозування властивостей металевих розплавів на основі параметрів міжатомної взаємодії» сконцентрована увага на створенні базового комплексу оперативних прогнозних моделей, розроблених на основі накопичених експериментальних даних про хімічний склад та фізико-хімічні, теплофізичні властивості сталей, шлаків та феросплавів вітчизняного виробництва. Показано, що однокомпонентні металеві розплави, які виступають у ролі матричної основи або складових компонентів багатокомпонентних систем (сталі, шлаки, феросплави) є мікронеоднорідними по своїй будові та мають тісний взаємозв'язок з параметром міжатомної взаємодії (ρ_l), як градієнта зміни стійкості їх решітки (рис.1), а отже неоднорідність розплаву зростає при збільшенні покомпонентності його складу, що потребує створення додаткових температурних умов для досягнення стану гомогенізації. Слід здійснювати підбір хімічних елементів, близьких по значенням показників параметру спрямованої зарядової щільності ρ_l, як критерію гетерогенності, що відображає температуру існування мікрогетерогенних областей та дозволяє уникнути невиправданого перегріву сплаву, знизити енергетичні витрати на виробництво, раціоналізувати використання сировинних запасів та пришвидшити формування однорідності системи.



а) б)

Рис. 1 – Взаємозв'язок з параметром міжатомної взаємодії ρ_l: а – температури існування кластерів однокомпонентних металевих розплавів; б – об'єму, який приходиться на один атом у кластері відносної характеристики

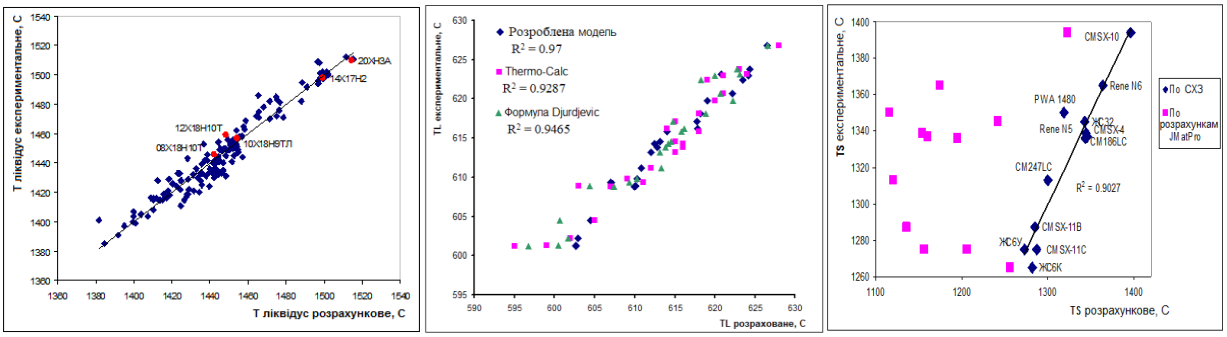
У результаті проведеного кореляційно-регресійного аналізу опосередковано враховано вплив мікронеоднорідності, вираженої у параметрі міжатомної взаємодії ρ_l, при генерації структури моделей для прогнозування структурно-чуттєвих характеристик сталей та сплавів широкої області застосування (хромонікелеві, інструментальні, конструкційні, рельсові сталі, жароміцні нікелеві, алюмінієві, магнієві сплави). Зокрема, для кожного класу сталей та сплавів цільового призначення досліджені індивідуальні особливості розплавів, які відображені у розроблених моделях та закодовані методом згортки їх хімічного складу у параметрах міжатомної взаємодії при прогнозуванні температур плавлення та кристалізації, як лімітуючих ланок повноти протікання термодинамічних реакцій та процесів гомогенізації розплаву (руйнування кластерних мікрообластей) (табл.1). Запропоновані моделі для визначення плавкості хромонікелевих сталей рекомендовано застосовувати при наявності основних елементів Cr, Ni від 0 до 30%; для залізовуглецевих сталей обмеження по вмісту заліза у матриці розплаву до 97%, а сумарної легуючої складової до 20%; для алюмінієвих та магнієвих сплавів характерна конструкційна схожість моделей, що пов'язано з кластерною подібністю будови їх однокомпонентних металевих розплавів (Al, Mg), які складають основу даного класу сплавів (рис.1.).

Таблиця 1 – Особливості прогнозування плавкості (температур ліквідус та солідус) металевих розплавів

Розплав	Модель	Точність	Особливість
Хромонікелеві сталі	$T_L = 10^3 \times (1{,}673 + 0{,}199$ $Z^Y + 0{,}387\ d + 11{,}122\ tg\alpha)$ $T_S = 10^3 \times (0{,}452 + 0{,}186$ $Z^Y + 0{,}956\ d + 16{,}434\ tg\alpha)$	$R^2 \geq 0{,}93$	Вплив елементів легуючої підсистеми
Залізовуглецеві сталі (інструментальні, конструкційні, рельсові та інші)	$T_L = 10^3 \times (2{,}994 + 0{,}176$ $Z^Y - 0{,}476\rho_l)$ $T_S = 10^3 \times (6{,}359 + 0{,}566$ $Z^Y - 1{,}571\rho_l)$	$R^2 \geq 0{,}93$	Вміст заліза у матриці розплаву
Жароміцні нікелеві сплави	$T_L = 10^3 \times (1{,}195 - 0{,}112$ $\rho_l + 9{,}198\ tg\alpha_\gamma)$ $T_S = 10^3 \times (1{,}456 - 0{,}21\ \rho_l$ $+ 8{,}712\ tg\alpha_\gamma)$	$R^2 \geq 0{,}82$	Тугоплавкі зміцнювачі розплаву (Mo, W, Re, Ru, Ta)
Алюмінієві сплави	$T_L = -205{,}25*(\rho_l) + 1011{,}5$	$R^2 \geq 0{,}97$	Основу розплавів складають легкі метали Al та Mg
Магнієві сплави	$T_L = -1065{,}6*(\rho_l) + 1968{,}5$	$R^2 \geq 0{,}92$	

Працездатність усіх розроблених аналітичних залежностей оцінювалась шляхом співставлення з експериментальними значеннями, іншими розрахунковими підходами та розрахунками за програмними комплексами, а також на даних, які не входили в висхідні вибірки при генерації моделей, що підтвердило їх адекватність та математичну стійкість (рис.2). Графічна інтерпретація

порівняльного аналізу точності прогнозу по розробленим моделям та існуючим підходам для різних класів сталей та сплавів представлена на рис.2. Для репрезентативної вибірки даних хромонікелевих сталей (n = 151) розроблені моделі були додатково проекзаменовані на незалежних даних, які не ввійшли до висхідної вибірки (рис.2а), та характеризуються достатньою узгодженістю експериментальних та розрахункових значень. Розбіжності в точності прогнозних методів комплексу Thermo-Calc та формулы Djurdjevic від запропонованої моделі для алюмінієвих сплавів визвані тим, що у перших закладена тільки взаємодія між двома елементами в бінарній системі Al-Si, при цьому інші можливі варіанти взаємодій компонентів розплавів упускаються, що і спричинило зниження точності прогнозу (рис.2б).



а б в

Рис.2 – Порівняльна оцінка точності та прогнозних можливостей розроблених моделей для різних класів сталей та сплавів з іншими розрахунковими підходами та програмними комплексами: а - хромонікелеві сталі; б – алюмінієві сплави; в – жароміцні нікелеві сплави

Як показав порівняльний аналіз прогнозних значень по запропонованій моделі (похибка прогнозу - ξ, % = 0,66%) для жароміцних нікелевих сплавів, а при проведенні розрахунків з використанням програмного спеціалізованого комплексу JMatPro спостерігається значна розбіжність та похибка прогнозу зростає до ξ, % = 10,30% (рис.2в), що спричинено виходом за границі діапазону хімічних складів досліджуваних сплавів, для яких був розроблений цей програмний пакет заснований на модифікованому наближенні Шайла. По аналогії з прогнозуванням металевих розплавів сталей, яке розглянуто вище, у якості відправних положень при моделюванні феросплавних багатокомпонентних розплавів феросиліцію, феромарганцю, феросилікомарганцю та інших вітчизняного виробництва обрана концепція спрямованого хімічного зв’язку. Для цього була сформована представницька покласова вибірка хімічних складів і властивостей феросплавів та проведена розрахунково-аналітична оцінка взаємозв’язків з інтегральними параметрами міжатомної взаємодії та з урахуванням індивідуальних особливостей їх факторного навантаження при моделюванні.

Аналіз взаємозв’язків властивостей феросиліцію з параметрами міжатомної взаємодії дозволив встановити, що у деяких випадках достатньо одного модельного параметру для високоточного прогнозування. Так, на рис. 3 показаний зв'язок щільності з параметром Z^Y розплавів феросиліцію, який характеризується високим

коефіцієнтом кореляції (R^2=0,96), що дає підставу використовувати його в якості модельного параметра при прогнозуванні. Значення щільності промислових феросплавів для ефективного протікання реакцій взаємодії на границі розділу фаз «метал-добавка» повинні бути наближені до щільності металевого розплаву, в який вводиться добавка (зазвичай на рівні 5000-7000 кг/м^3). До таких належать ФС20, ФС25, ФС45, які займають верхнє положення на рис.3 та щільність яких лімітується зарядовим станом системи Z^Y. У той же час, для марок ФС90, ФС92 низькі значення параметру Z^Y до 1.3 (рис.3), які спричинені наближенням цих розплавів до моносплаву по вмісту кремнію, та низька щільність приведуть до їх активного окислення і низького коефіцієнту засвоєння провідного елементу.

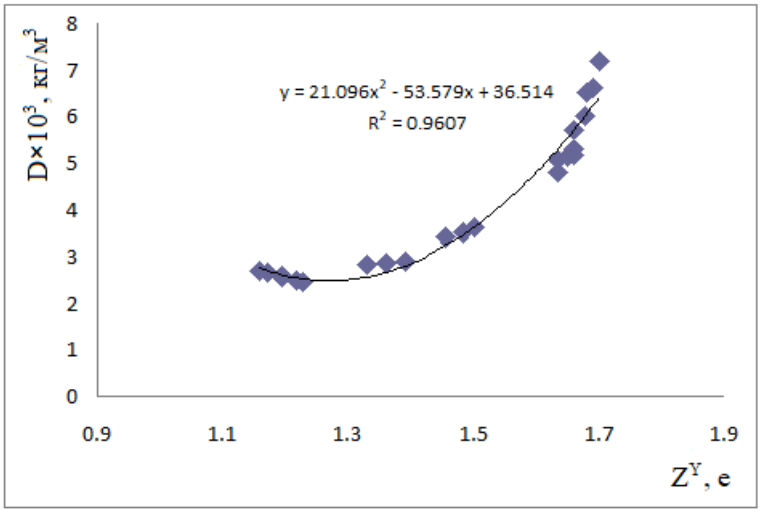


Рис. 3 – Взаємозв'язок щільності (D) від зарядового стану розплавів феросиліцію (Z^Y)

Враховуючи інформативність параметрів міжатомної взаємодії сформовані моделі для прогнозування властивостей феросиліцію мають вид: $T_{пл} = f(Z^Y, \rho_l)$ R^2 = 0,6488; D = $f(Z^Y)$ R^2 = 0,9607 ; $C_{тв} = f(d)$ R^2 = 0,7696 ; $\lambda = f(\rho_l)$ R^2 = 0,9843; Q = $f(\rho_l)$ R^2 = 0,9537; $\rho = f(\rho_l)$ R^2 = 0,9666; $\sigma = f(tg\alpha)$ R^2 = 0,9817, де $T_{пл}$, °К – температура плавлення; D×10^3, кг/м^3 – густина; $C_{тв}$, Дж/кгК – теплоємність; λ, Вт/ м×К – теплопровідність; Q, КДж/кг – теплота плавлення; ρ, мОм×м – питомий електроопір; σ, МПа – тимчасовий опір.

Залежність (рис.4) ілюструє, що оптимальними комбінаціями будуть марганецьвмісні феросплави, ρl яких знаходиться в області 3,5÷3,7 ен/нм з найменшою тривалістю плавлення, що свідчить про слабкі міжкластерні зв'язки у феросплаві та високу активність сполучення з металевим розплавом при обробці на УКП. Область 2 має більший час плавлення марганецьвмісних феросплавів, адже у ньому додатково присутній ванадій, який по своїм фізико-хімічним особливостям належить до тугоплавких елементів та зміцнює міжатомні зв'язки у розплаві. Третя зона відрізняється зміцненням матриці сплаву ніобієм до 18% та необхідністю більш тривалої температурної та часової витримки для розірвання стійких зв'язків між атомами і утворення однорідного металевого розплаву.

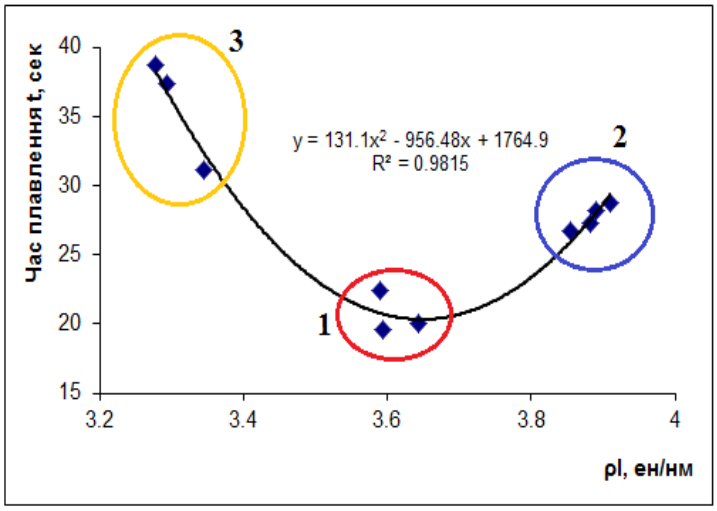


Рис.4 – Залежність часу плавлення марганецьвмісних феросплавів від параметру ρl

Аналіз взаємозв'язків параметрів міжатомної взаємодії з часом плавлення дозволив встановити найбільш інформативні з них, які покладені в основу аналітичних виразів для феросплавних систем Fe-Mn-V, Fe-Mn-Nb, Fe-Nb-Si, Fe-Nb-Al, Fe-Si-B, Fe-Mn-Si-V, Fe-Nb-Si-Al, Fe-Si-V-Mn, Fe-Mn-Si-V-Ti, Fe-Mn-Si-Nb-Al: а) для марганцевих феросплавів - $\tau, c = f(\rho l)$ R^2 = 0,982; б) ванадійвмісних феросплавів - $\tau, c = f(\rho l, tg\alpha)$ R^2 = 0,692; в) борвмісних феросплавів - $\tau, c = f(\rho l, d)$ R^2 = 0,903.

У третьому розділі «Прогнозування властивостей шлакових розплавів по схемі «склад-структура-властивості» показана роль шлаків у формуванні властивостей сталей на основі проведеного аналізу сучасних публікацій науковців-металургів та обґрунтована необхідність врахування їх значимості, як повноправної важливої складової фізико-хімічного процесу виплавки сталі, а не лише асоціювання шлакових розплавів з поняттям відходів виробництва сталі чи чавуну. Відмічено вплив на формування механічних, фізико-хімічних та експлуатаційних характеристик готової продукції провідних функцій шлакового розплаву, серед яких видалення шкідливих домішок (сірка, фосфор та інші), зменшення вмісту розчинених у металевому розплаві газів (газонасиченості), доведення за хімічним складом сталі з позиції міжатомної взаємодії у розплавах.

З метою отримання високочистої сталі по вмісту сірки застосовують шлакоутворюючі суміші, оскільки природного потенціалу уже сформованого шлакового розплаву до процесу позапічної обробки - недостатньо. Тому, для підбору раціонального складу шлакоутворюючої суміші необхідно оцінити з фізико-хімічної позиції термодинамічну доцільність добавки. Проведені розрахунки основних термодинамічних функцій показали, що добавки плавикового шпату та оксидів марганцю і магнію недоцільні у діапазоні температур 1400-1500 ºС (табл.2), оскільки протікання даних реакцій взаємодії не можливе по показанням параметру енергії Гіббса ($\Delta G \geq 0$). Слід зазначити, що марганець термодинамічно може виконувати роль десульфуратора до 1300 ºС поряд з оксидом кальцію.

Дані таблиці 2 свідчать, що безпосереднім десульфуратом у шлакових розплавах виступає CaO, а термодинамічно пасивні по відношенню до сірки плавиковий шпат, оксиди марганцю і магнію виконують супровідні функції (транспортна, підвищують активність оксиду кальцію, розріджують шлак, утворюють захисні плівки на вогнетриві захищаючи від руйнування).

Підтверджено хімічним аналізом шлаку при виплавці сталі 09Г2С в умовах ПАТ «Дніпровський металургійний комбінат» (ДМК) при введенні на установці ківш-піч шлакоутворюючих добавок плавикового шпату і вапна відсутність з'єднань типу MgS, MnS, FeF_2, однак присутні MgO, MnO та CaS, що узгоджується з приведеними розрахунками термодинамічних властивостей у табл.2.

Таблиця 2 – Термодинамічні властивості реакцій десульфурації

Реакція	ΔH, kcal	ΔS, cal/ K	ΔG, kcal	K	Log (K)
1400 ºC					
FeS + MgO = MgS + FeO	17,974	0,264	17,532	5,125E-003	-2,290
FeS + MnO = MnS + FeO	-2,590	-1,715	0,280	9,193E-001	-0,037
$FeS + CaF_2 = CaS + FeF_2$	30,363	-0,594	31,357	8,013E-005	-4,096
FeS + CaO = FeO + CaS	-4,588	-1,417	-2,218	1,949E+000	0,290
1500 ºC					
FeS + MgO = MgS + FeO	18,257	0,428	17,498	6,969E-003	-2,157
FeS + MnO = MnS + FeO	-2,409	-1,610	0,446	8,811E-001	-0,055
$FeS + CaF_2 = CaS + FeF_2$	23,048	-4,920	31,772	1,212E-004	-3,916
FeS + CaO = FeO + CaS	-4,298	-1,248	-2,085	1,807E+000	0,257

Актуалізація бази промисловими даними про хімічний склад та технологічні умови доведення сталі на УКП з використанням відправних положень концепції спрямованого хімічного зв'язку та розрахованих на її основі інтегральних параметрів міжатомної взаємодії дозволили виконати порівняльний аналіз (рис.5).

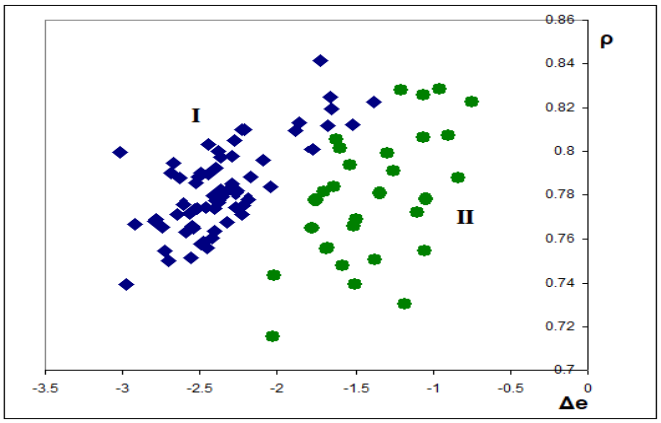


Рис. 5 – Класифікація промислових сталеплавильних шлаків по співвідношенню ρ до Δe: I – ДМК ◆; II – ДСС ●

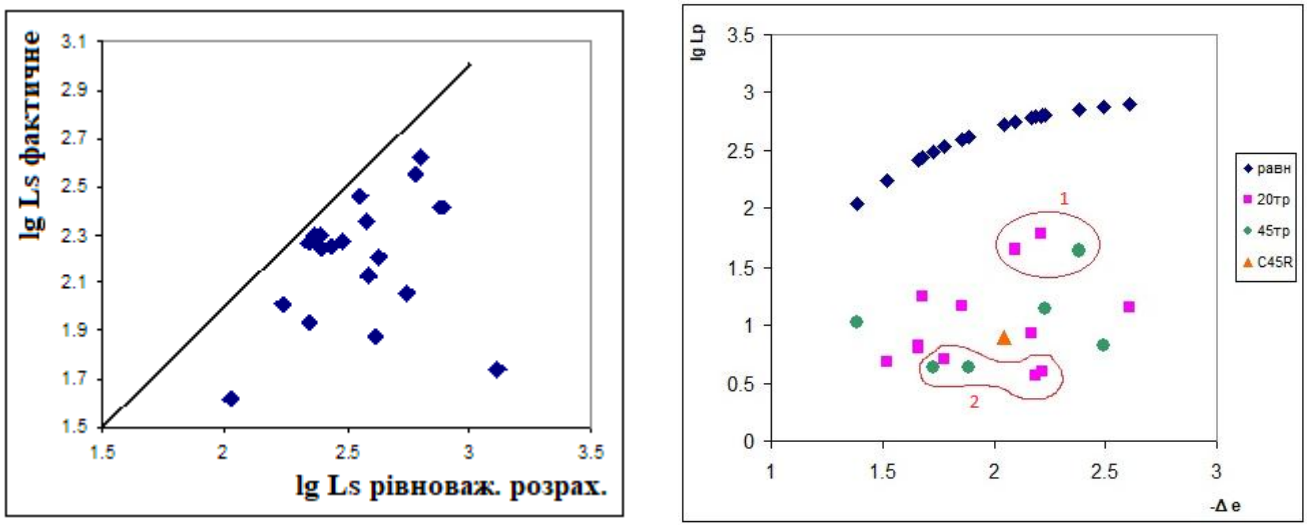
Розшарування на рисунку 5 підтверджує необхідність аналізу при моделюванні процесів в системі метал-шлак, як окремих статистичних вибірок. Залежність (рис.5) охоплює сталеплавильні шлаки заводів ДМК (20тр, 4тр, С45R, 09Г2С і її модифікації) і ПрАТ «Дніпроспецсталь» (ДСС) (Х12МФ, ШХ-15, 40Х2МА, 18ХГТ, 9Г2Ф та інші) при виплавці сталей широкого сортаментного ряду та відображає їх найбільш

інформативні модельні параметри з позицій опису десульфуруючої та сіркопоглинальної здатності шлакового розплаву: $C_s = f(\Delta e; \rho)$.

В четвертому розділі «Моделювання фізико-хімічних взаємодій в системі «метал-шлак» при доведенні сталі на УКП» з метою виявлення закономірностей розподілу елементів між металевою та шлаковою фазами проведений аналіз іонообмінних процесів і наближення досліджуваних систем до рівноважного стану, який відображає завершеність фізико-хімічних взаємодій між розплавами.

Математично-статистична обробка накопичених даних по виробництві трубної сталі дозволила провести оцінку наближення досліджуваних розплавів до рівноважного стану по розподілу сірки та фосфору (рис.6). Встановлено, що в системі «метал-шлак» досліджуваних сталей лише деякі плавки наближуються до рівноваги, а отже термодинамічна ємність шлакового розплаву по виведенню шкідливих домішок сірки та фосфору не повноцінно використана.

Значний розкид значень по сіркопоглинаючій здатності шлаків приведений на рис. 6а пов'язаний з оптимальним співвідношенням CaO / Al_2O_3, що свідчить про активну взаємодію рафінувального шлаку з футерівкою ківша, з якої захоплюються частки Al_2O_3 та підвищують вміст у шлаковій фазі кислих оксидів, в той час як для ефективного видалення сірки необхідно забезпечити високоосновний шлак (CaO). На рисунку 6.б виділено дві області: перша - плавки з найвищим ступенем наближення по фосфору з даної вибірки даних, друга - плавки з значним відхиленням від рівноважного стану, що пояснюється оптимальним співвідношенням $(CaO + MgO) / SiO_2$.



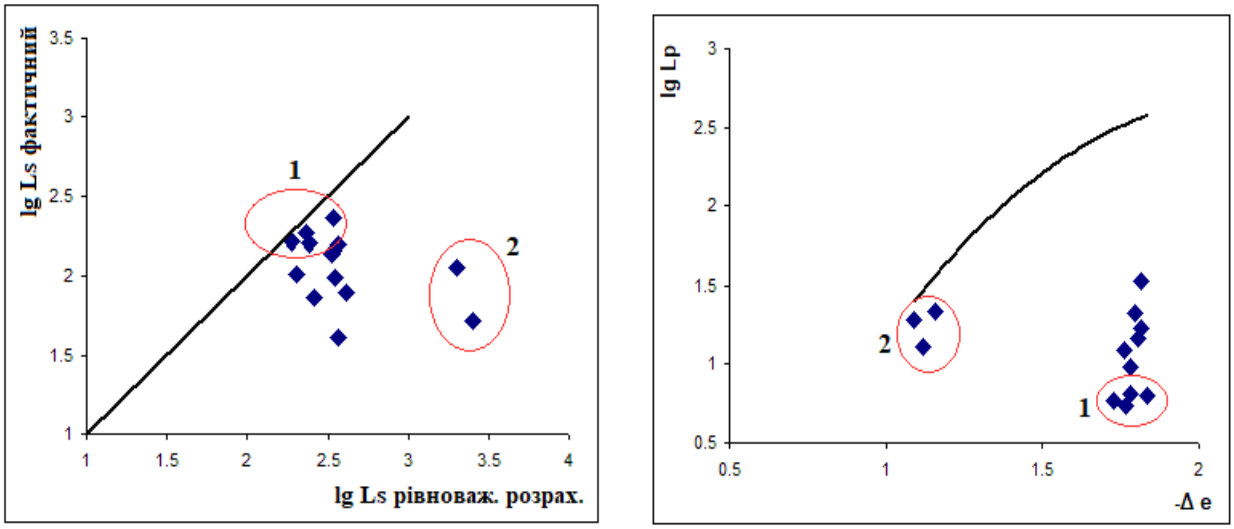
а) б)

Рис. 6 – Оцінка наближення системи до рівноважного стану по розподілу сірки (а) та фосфору (б) в системі «метал-шлак» при виробництві трубної сталі в умовах ДМК

Порівняльний аналіз фактичних значень про розподіл S і P (рис.7) між металом і шлаком з прогнозними рівноважними значеннями показав, що їх розподіл нижче рівноважного та фізико-хімічний потенціал шлаку недостатньо реалізований. У шлаках області 1 рис.7а вміст CaF_2 мас.% склав від 5,7 до 19,1, що створило відповідний розріджуючий ефект та активізувало кінетику міжатомної

взаємодії в розплавах, за рахунок даного прийому вдалось досягти максимальної сіркопоглинаючої здатності шлакового розплаву.

Важливий вклад в підвищення розподілу сірки для області 1 рис.7а відіграла конструкційна зміна, яка підтверджена патентом та порівнянням експериментальних плавок по новій технології зі старою. Суть полягала у зміні розміщення продувочної фурми у днищі ковша, за рахунок чого раціоналізували процес перемішування металу та у результаті чого зменшився об'єм застійних областей. Оскільки процеси десульфурації та дефосфорації є антагоністами по природі застосування технологічних прийомів, щодо їх покращення і сталі з області 1 рис.7а, відповідно мають низькі показники видалення фосфору область 2 рис.7б, що узгоджується з вибраними інформативними параметрами у розділі 3.

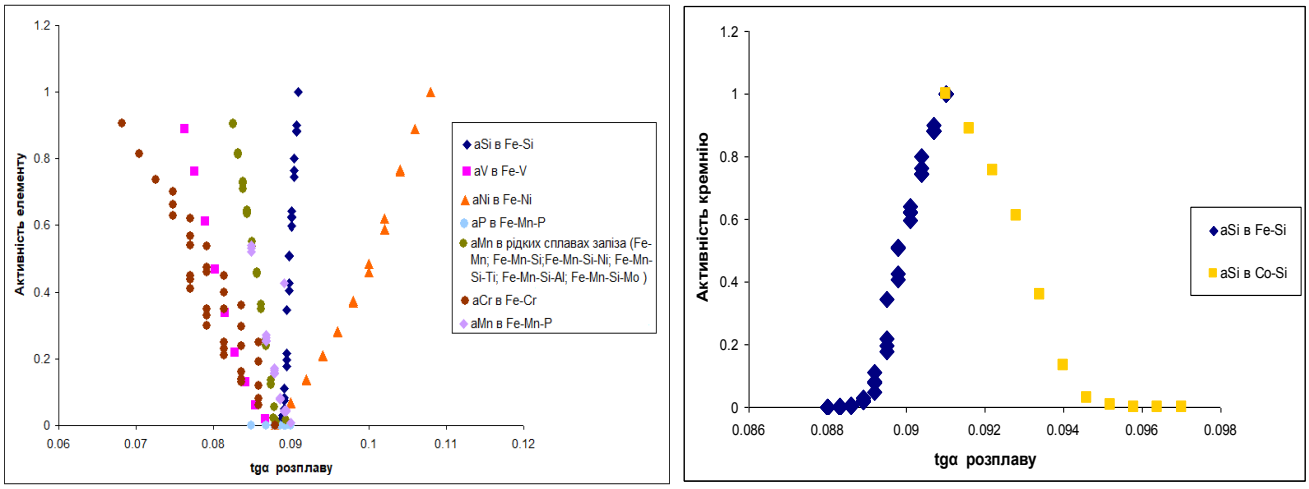


а) б)

Рис. 7 – Порівняння фактичного і рівноважного розподілу сірки (а) та фосфору (б) в системі «метал-шлак» при виробництві сталей класу ШХ15 в умовах ДСС

З метою реалізації більш глибокої дефосфорації і десульфурації металу проведений аналіз експериментальних даних активностей компонентів у металевій та шлаковій фазах, що можуть відображати направленість переходу елементу між ними, а отже дозволяють технологічно скорегувати момент та кількість введення добавки у ківш. На рисунку 8а крайнє праве та ліве положення займають значення активностей нікелю та хрому, як найбільш часто вживаних легуючих елементів у сталях та формують границі даної області; центральну зону посідає кремній, поділяючи на праву та ліву гілки по зміні радіусу іона; нижня область – активність шкідливої складової сплавів – фосфору. Розгалуження даних на рис.8а, де представлені експериментальні дані активностей Si, Mn, P, Ni, Cr, V у бінарних та багатокомпонентних розплавах, пов'язане з вираженням фізико-хімічної індивідуальності систем через градієнт зміни радіуса іона від його заряду, а отже процесу перезарядки (поділу електронів) між взаємодіючими атомами. Наглядність процесу перезарядки відображена при розгляді зміни активності у конкретно виділеному випадку для кремнію рис.8б у системах з кобальтом та залізом, перерозподіл електронів на зовнішніх оболонках цих атомів у напрямку їх зв'язку

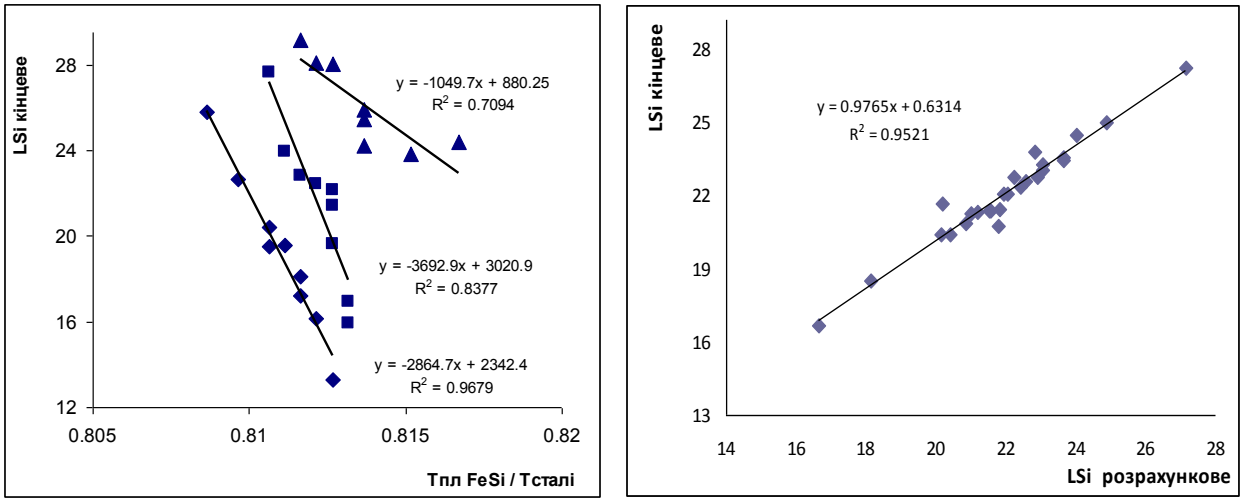
на користь кобальту призводить до зниження активності кремнію та зменшення радіуса іона по відношенню до заряду (tgα). Таким чином заряд та хімічна активність елементу є величиною змінною по відношенню до конкретного партнера при міжатомній взаємодії (рис.8).



а) б)

Рис. 8 – а) – залежність активностей елементів у металевих системах від параметру розплаву tgα; б) – зміна активності кремнію у складі систем з залізом та кобальтом

П'ятий розділ «Розробка комплексних показників для прогнозування коефіцієнтів розподілу елементів в системі метал-шлак при доведенні сталі на УКП» викладені матеріали по прогнозуванню розподілу елементів між кінцевими продуктами плавки. У результаті проведеного статистичного аналізу за визначенням критерію Стьюдента для сталі 09Г2С та її модифікацій встановлено значимість температурного фактору на розподіл кремнію у системі «метал-шлак» (рис.9).

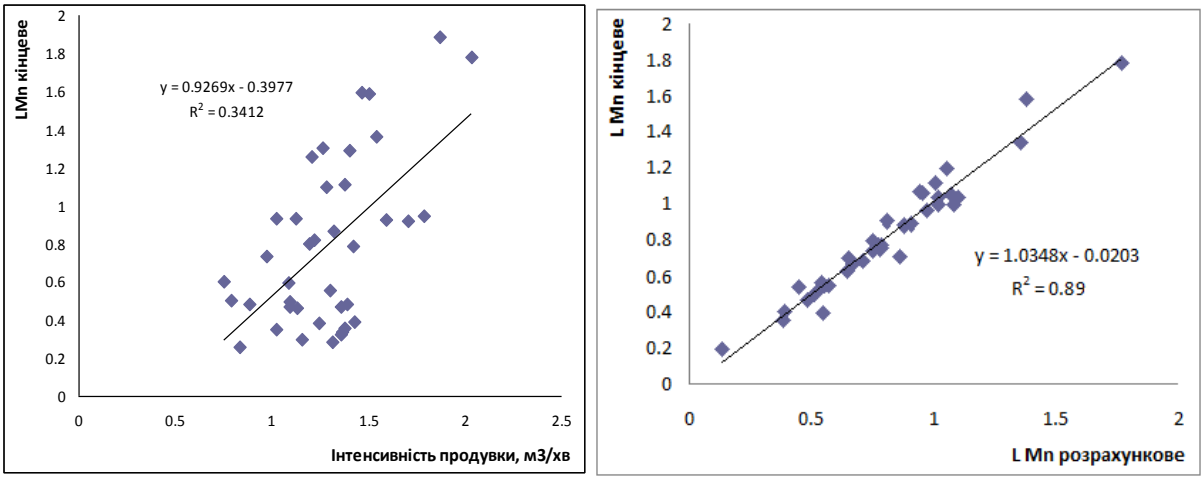


а) б)

Рис. 9 – а) – залежність коефіцієнту розподілу кремнію від співвідношення $T_{плFeSi}$ / $T_{сталі}$; б) – порівняльна оцінка точності розрахованих значень з кінцевим кремнієм

$L_{Si} = f\,(d_{поч\ Me}, tg\alpha_{поч\ Шл}, T_{плFeSi} / T_{сталі}, T_{поч\ Me}$, Інтенсивність продувки) $R^2 = 0{,}95$.

Кореляційно-регресійний аналіз дозволив встановити, що на розподіл марганцю між фазами впливає інтенсивність продувки (рис.10а), регулювання якої сприяє переміщенню марганцю у шлакову або ж у металеву фазу в залежності від поставленої цільової установки до конкретної марки сталі, як наслідок зарядовий стан системи перерозподіляється та враховується параметром $Z^y_{поч\ Me}$.



а) б)

Рис. 10 – а) – Вплив параметру технології на розподіл марганцю; б) – порівняльна оцінка точності розрахованих значень з кінцевим марганцем

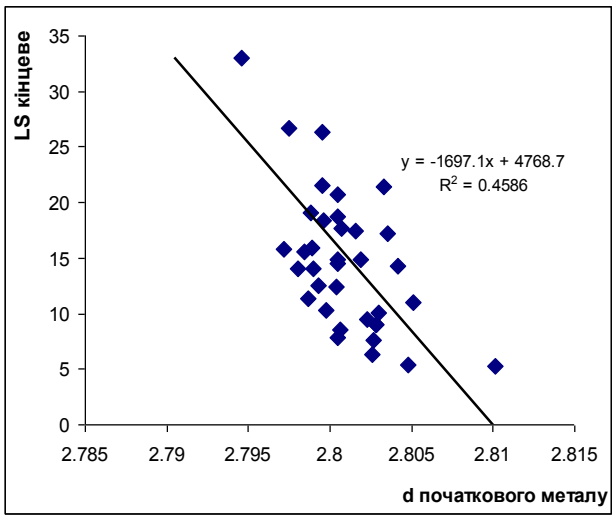
На ряду з інтенсивністю виявлена залежність від властивостей добавки феромарганцю (ФМн78), який вводили на УКП, а саме співвідношення температури його плавлення до температури сталі ($T_{плFeMn} / T_{сталі}$).

$L_{Mn} = f\,(Z^y_{поч\ Me}, T_{плFeMn} / T_{сталі}$, Інтенсивність продувки) $R^2 = 0{,}89$

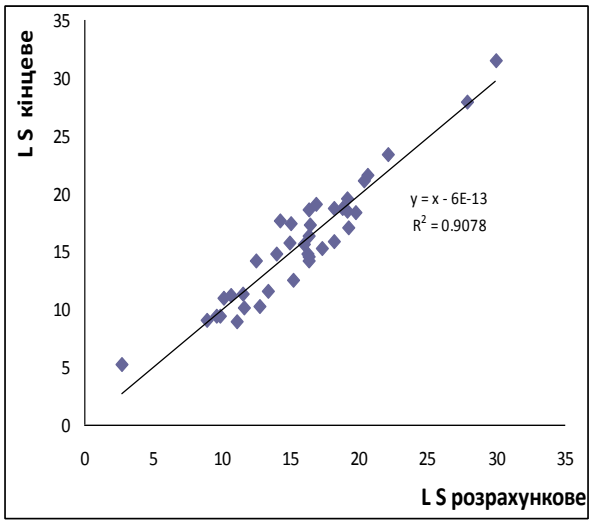
Як показав аналіз впливу параметрів міжатомного зв'язку на кінцевий вміст сірки, найбільш інформативним є середньостатистична між'ядерна відстань початкового металу d (рис.11а), при збільшенні якої зменшується кінцевий вміст сірки у шлаку, оскільки атоми сірки переходять у металеву фазу, через ослаблені зв'язки між компонентами сталі. У шлаковому розплаві сірка представлена аніонами, тому додаткове врахування зміни середньостатистичного числа електронів, локалізованих в напрямку зв'язку катіон-аніон (К-А), дозволяє підвищити точність оцінки перерозподілу сірки у системі «метал-шлак»:

$L_S = f\,(d_{поч\ Me}, \rho_{поч\ Шл}$, Інтенсивність продувки) $R^2 = 0{,}9078$

Встановлено, що іонообмінні процеси між $L_{Pпоч}$ та $L_{Pкін}$ залежні і їх зв'язок відзначається високим ступенем кореляції ($R^2 = 0{,}65$, рис.12), що свідчить про відсутність фізико-хімічних передумов для ефективного процесу дефосфорації. В даному випадку процес виведення фосфору у шлакову фазу регулюється технологічним фактором впливу, зокрема для плавок з максимальним показником $L_{Pкін}$ (виділені плавки).

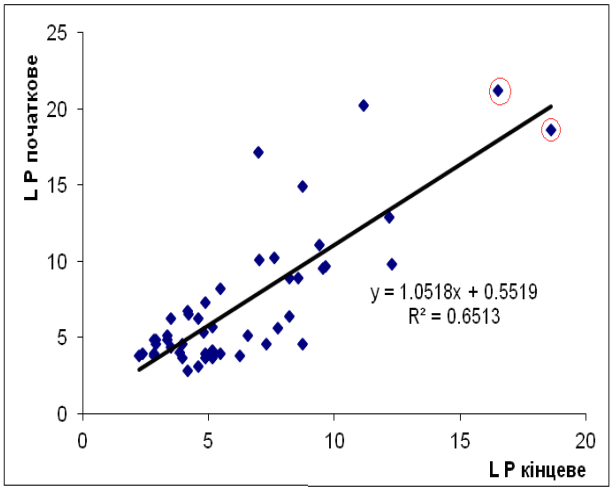


а)

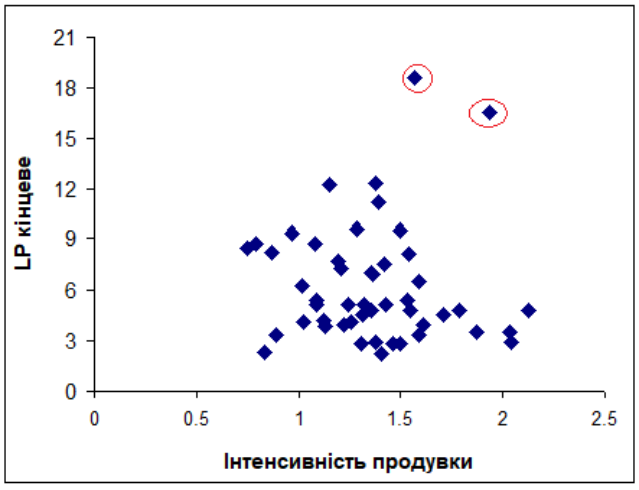


б)

Рис. 11 – а) – Вплив параметру $d_{поч\ Me}$ на розподіл сірки; б) – порівняльна оцінка точності розрахованих значень з кінцевим вмістом сірки



а)



б)

Рис. 12 – а) – взаємозв'язок початкового та кінцевого розподілу фосфору між металом та шлаком ; б) – залежність коефіцієнту розподілу фосфору від інтенсивності продувки

На основі виявлених залежностей коефіцієнтів розподілу від параметрів початкових розплавів, фізико-хімічних і теплофізичних властивостей добавок та технологічних параметрів позапічної обробки сталі розроблена макросхема алгоритму прогнозування складу кінцевих продуктів при доведенні сталі, який складає методику та відображає поставлені завдання дисертаційної роботи (рис.13). Першим етапом до реалізації дії макросхеми є систематизація та експертна оцінка достовірності промислових даних, що включає в себе фільтрацію «зашумленості» та аналіз «викидів», наявність яких може бути спричинена ймовірною похибкою проведеного хімічного аналізу внаслідок різної природи факторів, тому слід виключити такі дані з вихідної вибірки.

У результаті критичної оцінки розрізненого масиву даних формується достовірна вибірка для фізико-хімічного аналізу. Згідно з концепцією (рис. 10) виконуються розрахунково-аналітичні дослідження по впливу складу висхідних продуктів на УКП, добавок, що вводять, та параметрів технології для формування кінцевого складу сталі, а також аналогічно для кінцевого шлакового розплаву. Виявлені закономірності складають основу наступного блоку, спрямованого на розробку моделей та алгоритму для прогнозування продуктів доведення сталі з урахуванням ефективності розподілу елементів між металевою та шлаковою фазами. Особливість трактування розподілу компонентів між кінцевим металом та шлаком, згідно даного підходу, полягає у вираженні через початкові параметри міжатомної взаємодії металу, шлаку, добавок та комплексні співвідношення їх фізико-хімічних, теплофізичних властивостей і технологічні показники обробки. Подальшим є перевірка умов узгодженості кінцевих розплавів та наближення їх до рівноважного стану, по якому оцінюється ступінь завершеності основних термодинамічних взаємодій.

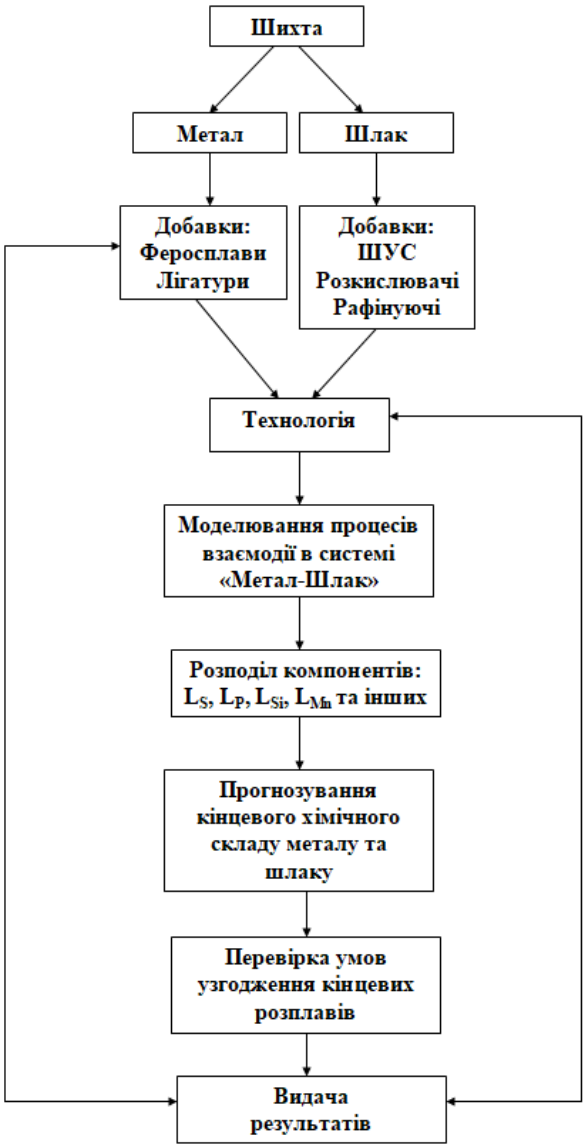


Рис. 13 – Концептуальна схема для вирішення задач прогнозування кінцевих продуктів сталі

Одержані в роботі результати по прогнозуванню коефіцієнтів розподілу елементів між кінцевими продуктами у системі «метал-шлак» є підґрунтям для виробки рекомендацій щодо вибору ефективних добавок та технологічного фактору, які забезпечать одержання сталі, що відповідає затребуваним показникам. У разі, коли унеможливлюється регулювання блоків технології та добавок по запронованій схемі у зв'язку з жорсткими вимогами замовника, рекомендується у якості альтернативи перегляд якості шихтових матеріалів, також одним із ефективних методів з обов'язковою економічною оцінкою доцільності є проведення конструкційного переобладнання.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі зроблено теоретичне узагальнення і запропоновано нове вирішення важливої наукової задачі, суть якої полягає у розробці критеріїв для оцінки ефективності протікання процесів доведення сталі на УКП та методики спрямованого формування розподілу елементів між продуктами плавки для забезпечення максимально можливого засвоєння добавок металургійним розплавом.

1. Виконано аналіз сучасних способів введення добавок з метою корегування хімічного складу сталі, форми та фізичного їх стану на момент присадки, підходів до оцінки ступеню засвоєння з позиції ефективності їх застосування в реальних промислових процесах та обґрунтовано актуальність проведення досліджень, спрямованих на розробку критеріїв та ефективних управляючих дій по підвищенню ступеню засвоєння добавок. Спираючись на результати аналізу і узагальнення переваг та недоліків теорій, концепцій, моделей, підходів до опису будови металевих й шлакових розплавів та їх можливостей у прогнозуванні фізико-хімічних, теплофізичних властивостей металургійних розплавів обґрунтований вибір моделі їх структури на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку, розробленої Е.В. Приходько.

2. Актуалізовані наявні в Інституті чорної металургії ім. З.І. Некрасова НАН України бази даних «Шлак», «Метал», «Феросплави» банку даних «Металургія» новими експериментальними, літературними, промисловими даними про хімічний склад, властивості та технологічні особливості виплавки сталей та сплавів цільового призначення, які послугували інформаційною основою для створення репрезентативних досліджуваних вибірок даних.

3. У результаті виявлених закономірностей впливу параметрів міжатомної взаємодії на фізико-хімічні, теплофізичні властивості сталей та сплавів (залізовуглецевих та хромонікелевих сталей, алюмінієвих, магнієвих, жароміцних нікелевих сплавів) розроблені аналітичні залежності для їх прогнозування з точністю $R^2 \geq 0,9$. Проведена експертна оцінка розроблених моделей у порівнянні з існуючими підходами та розрахунками за провідними спеціалізованими комп'ютерними програмами, що підтвердило їх стійкість та працездатність. Як показав порівняльний аналіз, зокрема для вибірки даних по жароміцним нікелевим сплавам розрахованих значень по запропонованій моделі - похибка прогнозу ξ, % = 0,66, а при використанні программного комплексу JMatPro ξ, % = 10,30.

4. З метою формування фізико-хімічних передумов для оцінки ефективності розподілу добавок розроблені аналітичні вирази на основі експериментальних даних вітчизняних марок феросплавів (феросиліцій, феромарганець, феросилікомарганець) для прогнозування їх провідних фізико-хімічних та теплофізичних властивостей .

5. Для конкретних умов виробництва сталей на заводах ПАТ «Дніпровський металургійний комбінат» (ДМК) та ПрАТ «Дніпроспецсталь» (ДСС) виконано аналіз наближення шлакових розплавів до рівноважного стану по розподілу сірки, фосфору трубних та підшипникових сталей. Показано, що термодинамічний потенціал та ємність шлаку при порівнянні рівноважного та фактичного використані не повноцінно. При застосуванні конструкційної зміни розміщення продувочної фурми у днищі ковша на ПрАТ «Дніпроспецсталь» коефіцієнт розподілу сірки для сталі ШХ-15 і її модифікацій по новій технології зріс на 28% по відношенню до плавок зі старою технологією. Встановлено, що для трубних марок сталей, які виготовляються в умовах ПАТ «Дніпровський металургійний комбінат» забезпечення максимальної сіркопоглинаючої є оптимальне співвідношення CaO/Al_2O_3 на рівні 6÷12, а дефосфоруючої здатності співвідношенням $(CaO + MgO)/SiO_2$ 2÷4.

6. З метою підвищення ступеня реалізованості процесів десульфурації та дефосфорації проведений аналіз експериментальних даних активностей компонентів у розплавах. Обґрунтована інформативна значимість параметру tgα у процесах перезарядки, що відображає хімічну активність елементу в металургійному розплаві та використання його у якості модельного підвищує точність прогнозу до $R^2 \geq 0,9$.

7. Розроблена концептуальна схема, яка являється підґрунтям для реалізації алгоритму по прогнозуванню продуктів плавки з урахуванням ефективності розподілу елементів між металевою і шлаковою фазами на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Статті у наукових періодичних виданнях, що включено до міжнародних науково-метричних баз:

1. Justification for Choosing Alloying and Micro-Alloying Elements to Improve the Mechanical Properties of Railway Wheels / A. I. Babachenko, D. N. Togobitskaya, A. A. Kononenko, **I. R. Snigura**, O. V. Kuksa. - ISSN 0967-0912, Steel in Translation, 2020, Vol. 50, No. 11, pp. 815–821. (Scopus)

Статті у наукових фахових виданнях:

2. Д.Н. Тогобицкая, М. Шапер, О. Гридин, **И.Р. Снигура**. Компьютерное моделирование температур плавления и кристаллизации сплавов специального назначения. – Сталь. № 6. 2018 г. – С. 11 – 15.

3. A.I. Babachenko, D.N. Togobitskaya, A.S. Kozachyok, A.A. Kononenko, A.V. Knysh, **I.R. Snigura** Optimization of chemical composition of steel for railroad

wheels providing stabilization of mechanical and increase of operational properties – Metallurgy and heat treatment of metals – 2017, №3. – С. 32 – 39.

4. **И.Р. Снигура**, Д.Н. Тогобицкая Прогнозирование температур плавления и кристаллизации хромоникелевых сталей. – Сучасні проблеми металургії. Наукові вісті. № 21, Вып. 1, 2018 год. – С. 67 – 72.

5. Д.Н. Тогобицкая, В.П. Пиптюк, А.Ф. Петров, С.В. Греков, **И.Р. Снигура**, Ю.М. Лихачев, Л.А. Головко. Базы данных и модели для экспертной оценки эффективности использования ферросплавов при производстве стали – Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии, сборник научных трудов, Вып. № 31, 2017 год, С. 150 – 165.

6. Піптюк В.П., Тогобицька Д.М., Логозинський І.М., Левин Б.А., Петров О.П., Греков С.В., **Снігура І.Р**. Перспективи генерації феросплавів нового покоління для легування та мікролегування сталі. – Системні технології. Регіональний міжвузівський збірник наукових праць. – Випуск 4 (117). – Дніпро, 2018. – С. 52 – 60.

Матеріали наукових конференцій:

7. **І.Р. Снігура,** Д.М. Тогобицька Фізико-хімічне моделювання розподілу елементів в системі «метал-шлак» на основі параметрів міжатомної взаємодії. Литво. Металургія. 2019: Матеріали XV Міжнародної науково-практичної конференції . – Запоріжжя, 2019. – С. 355 – 357.

8. D.N. Togobitskaia, **I.R. Snihura**. Prediction of liquidus and solidus temperatures of steels and alloys for special purposes. IX International conference of young scientists on welding and related technologies, 23-26 May 2017, Kyiv, Ukraine. p. 228.

9. **Снігура І.Р.,** Тогобицька Д.М., Греков С.В. Новий підхід до обґрунтування рішень для ефективного засвоєння легуючих добавок при позапічній обробці сталі – Збірник матеріалів Всеукраїнської конференції молодих вчених «Молодь і наука. Практика інноваційного пошуку». – м. Дніпро 2019, 18 грудня 2019 р. – С. 134 – 137

10. **І.Р. Снігура**, Д.М. Тогобицька, В.П. Піптюк, С.В. Греков. Генерація комплексних параметрів впливу на розподіл елементів в системі «метал-шлак» при позапічній обробці сталі. Литво. Металургія. 2020: Матеріали XVI Міжнародної науково-практичної конференції (8-10 вересня 2020 р., м. Запоріжжя) / Під заг. ред. Д.т.н., проф.. Пономаренко О.І. – Запоріжжя, ФОП Мокшанов В.В. – С. 301 – 303

11. Д.Н. Тогобицкая, В.П. Пиптюк, **И.Р. Снигура**, Н.А. Цюпа, Д. А. Степаненко, Г.А. Андриевский Моделирование распределения элементов в системе «Металл-Шлак» при производстве трубной стали в условиях ДМК. Университетская наука - 2018: Международная научно-техническая конференция: Сб. тезисов докладов: в 3 т. Т. 1-й. ГВУЗ «ПГТУ». – Мариуполь, 2018. – С. 69 – 71.

12. Актуалізація фундаментальних документально-фактографічних баз даних сталеплавильних шлаків / Д.О. Степаненко, Н.О. Цюпа, О.С. Скачко, **І.Р. Снігура** // Матеріали Міжнародної наукової конференції «Матеріали для роботи в екстремальних умовах». – м. Київ 2018, 6 – 7 грудня 2018 р. – С. 343-346

13. Тогобицкая Д.Н., Петров А.Ф., **Снигура И.Р.,** Головко Л.А., Греков С.В. Моделирование физико-химических характеристик комплексных

хромсодержащих ферросплавов – Труды научно-практической конференции с международным участием и элементами школы молодых ученых «Перспективы развития металлургии и машиностроения с использованием завершенных фундаментальних исследований и НИОКР». – Екатеринбург: УрО РАН, 2020. – С. 96 – 99.

Патенти:

14. А.с. № 70524 Україна. «Методика вибору хімічного складу сталі в рамках діапазонів регламентованих ГОСТом, який забезпечує стабілізацію механічних властивостей металопродукції на раціональному рівні» / Тогобицька Д.М., Козачок О.С., **Снігура І.Р.** Заявл. № 70012 26.12.2016. Регистр. 20.02.17

15. Патент України UA 122852 C2 на винахід. Сталерозливний ківш для позапічної обробки металу / Піптюк В.П., Самохвалов С.Є., Тогобицька Д.М., Логозинський І.М., Мазурук С.Л., Греков С.В., Красніков К.С., **Снігура І.Р.** – заявл. 29.07.19; опубл. 06.01.21, Бюл. № 1, 2021 р.

АНОТАЦІЯ

Снігура І.Р. «Розробка критеріїв та комплексних показників для опису фізико-хімічних взаємодій в системі «метал-шлак» при позапічній обробці сталі»

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 05.16.02 «Металургія чорних та кольорових металів і спеціальних сплавів». ─ Національна металургійна академія України, Дніпро, 2021.

Дисертація присвячена вирішенню актуальної задачі – розробці комплексних показників фізико-хімічних, теплофізичних властивостей металевих, шлакових розплавів і добавок з метою спрямованого їх впливу на коефіцієнти розподілу елементів між кінцевими продуктами плавки при позапічній обробці сталі.

Вперше розкрито фізико-хімічний потенціал параметрів міжатомної взаємодії, зокрема ρl – з позицій оцінки мікронеоднорідності металургійних розплавів та tgα – як показника процесів перезарядки та хімічної активності металевих систем і встановлена їх інформативна значущість при прогнозуванні властивостей сталей і сплавів цільового призначення. З позиції іонообмінних процесів у системі «метал-шлак» проведена оцінка термодинамічної ємності шлакового розплаву щодо видалення сірки та фосфору по наближенню системи до рівноважного стану для умов виробництва ДМК (конструкційних 09Г2С та її модифікацій) та ДСС (підшипникових ШХ-15 і її модифікацій) сталей. Розроблена оригінальна концептуальна схема для вирішення задач прогнозування кінцевих продуктів плавки, суть якої полягає у вираженні їх як функцій залежності від початкових параметрів металу, шлаку, добавки та технології, працездатність якої відпрацьована на прикладі конструкційної та підшипникової сталей.

Ключові слова: Концепція спрямованого хімічного зв'язку, параметри міжатомної взаємодії, властивості металургійних розплавів, розподіл елементів, система «метал-шлак», прогнозування, УКП

SUMMARY

Snigura I.R. «Development of criteria and complex indicators for the description of physicochemical interactions in the system "metal-slag" during out-of-furnace processing of steel»

The dissertation on a competition of academic degree of Candidate of Technical Sciences for specialty 05.16.02 «Metallurgy of ferrous and nonferrous metals and special alloys». ─ National metallurgical academy of Ukraine, Dnipro, 2021.

The dissertation is devoted to the decision of a topical question - development of complex indicators of physicochemical, thermophysical properties of metal, slag melts and additives for the purpose of their directed influence on coefficients of distribution of elements between final products of melting at finishing of steel on installation of ladle-furnace.

The physicochemical potential of interatomic interaction parameters was revealed for the first time, in particular ρl - from the standpoint of estimating microheterogeneity of metallurgical melts, and tgα - as an indicator of recharging processes and chemical activity of metal systems and their informative significance in predicting properties of steels and alloys. From the standpoint of ion exchange processes in the "metal-slag" system, the thermodynamic capacity of the slag melt to remove sulfur and phosphorus was estimated to bring the system closer to the equilibrium state for the conditions of production of DMK and DSS. An original conceptual scheme for solving problems of forecasting final products, the essence of which is to express the final products of smelting as a function of dependence on the initial parameters of metal, slag, additives and technology, the efficiency of which is tested on the example of structural and ball bearings.

Keywords: The concept of directed chemical bonding, parameters of interatomic interaction, properties of metallurgical melts, distribution of elements, system "metal-slag", forecasting, installation of ladle-furnace