

УДК: 669.168: 669.26.0018

А. Ф. Петров, О. В. Кукса, Л. А. Головки, Н. Е. Ходотова

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩИХ ФЕРРОСПЛАВОВ*Институт черной металлургии им. З. И. Некрасова НАН Украины*

Целью работы является изучение возможности использования интегральных и парциальных модельных параметров межатомного взаимодействия для системного исследования важнейших потребительских свойств никелевых ферросплавов, применяемых для легирования стали и сплавов. В работе использован разработанный в Институте черной металлургии НАН Украины новый подход к решению задач прогнозирования свойств сплавов, связывающий между собой состав, структуру и свойства расплавов. С применением экспериментальных данных о теплоте плавления, теплоемкости, теплопроводности, коэффициенте температуропроводности ферроникеля, ферробора, ферромolibдена, ферровольфрама, ферроциркония и других ферросплавов были получены уравнения, позволяющие предварительно оценивать эти свойства. Анализ экспериментальных данных показал, что плотность жидких и твердых сплавов железо-никель-хром и температуры их плавления тесно связаны с параметрами межатомного взаимодействия. С использованием параметров межатомного взаимодействия и экспериментальных данных получены уравнения для описания зависимости температуры кристаллизации, удельной плотности, удельной теплоемкости, теплопроводности хромоникельсодержащих ферросплавов от параметров межатомного взаимодействия. С использованием приведенных уравнений путем модельного прогнозирования оценены температуры плавления и плотности ферроникеля (ФН-5М). Разработанные полупирические модели могут быть использованы для прогнозирования свойств стандартных марок ферросплавов как внутри отдельной марки, так и всего сортаментного ряда ферросплавов. Это позволяет оценивать эффективности применения ферросплавов на основных этапах сталеплавленного передела.

Ключевые слова: ферросплавы, свойства, критерии, прогнозные модели, параметры межатомного взаимодействия

Современное состояние вопроса. В современных условиях сложилась явная тенденция значительного увеличения доли коррозионностойких (нержавеющих) сталей. Основными легирующими элементами в этих сталях являются хром и никель, суммарное содержание которых достигает 30%. Потребность в никеле для выплавки специальных сталей удовлетворяется главным образом за счет электролитического никеля (~99% Ni), высокая цена которого не способствует развитию производства никельсодержащих сталей. Во многих случаях вместо чистого никеля - дорогого и дефицитного - может быть использован ферроникель, себестоимость производства которого (как и многих других ферросплавов) ниже, чем чистого металла. В то же время известно, что на рынке легирующих материалов имеется дефицит относительно дешевых никелевых и комплексных ферросплавов,

*«Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии»,
Сборник научных трудов ИЧМ. – 2018. - Вып.32*

содержащих 10-30% Ni [1].

Для применения новых ферросплавов при обработке стали необходимо изучение их физико-химических характеристик, что позволяет оптимизировать их плотность, температуру плавления, окисляемость, время плавления и ряд других свойств, влияющих на служебные характеристики (усвоение стали элементами, входящих в состав ферросплавов; методы их ввода и т.д.) [2].

Имеющаяся практика экспериментального определения свойств ферросплавов в настоящий момент проблематична по причинам сложного аппаратного и организационного оформления, а также в виду требуемых значительных финансовых затрат. Отсутствие, ограниченность, наличие противоречивой информации об экспериментальных данных о физико-химических и теплофизических свойствах, в том числе дорогостоящих и импортируемых ферросплавов затрудняет решение технологических вопросов, в т.ч. по эффективному их применению. В настоящее время отсутствует и комплексный метод, который бы позволял разрабатывать рациональные композиции ферросплавов для обработки металлических расплавов [3].

Учитывая ограниченность и спорность информации по отдельным характеристикам ферросплавов, особый научный и практический интерес представляют расчётные методы определения их свойств, позволяющие прогнозировать составы ферросплавов с оптимальными характеристиками. В то же время, ни одна из известных на сегодняшний день моделей математического описания зависимостей свойств от состава не обеспечивает системного перехода от анализа бинарных к более сложным многокомпонентным системам, к которым относятся ферросплавы. Фактически для каждой бинарной, а тем более многокомпонентной системы, эмпирическим путем подбирается индивидуальная модель для количественного описания и теоретического объяснения зависимостей изменения свойств от концентрации компонентов. Поэтому, в ряде случаев приходится прибегать к неоправданной экстраполяции опытных данных или использовать формулы сомнительной точности.

Устранение указанных выше недостатков возможно за счет использования разработанного в ИЧМ НАНУ нового подхода к решению задач, связывающего между собой состав, структуру и свойства расплавов [4,5]. Он ориентирован на разработку методики и критериев для количественной оценки и учета микронеоднородности в формировании свойств многокомпонентных металлических систем, и прогнозирование на их основе потребительских свойств широкой гаммы промышленных ферросплавов, описание межатомного взаимодействия в которых позволяет глубже понять механизм процессов легирования, раскисления и модифицирования стали. Разработка методики «свертки» информации о

составе для обобщения экспериментальных данных об интегральных термодинамических свойствах ΔH , ΔG , ΔS для бинарных и тройных систем, самых разнообразных по характеру химической связи и степени микронеоднородности структуры, создали научную базу для целенаправленного теоретического обобщения информации о свойствах систем ферросплавного производства [6–8].

Предлагаемая методика многофакторного физико-химического моделирования базируется на вводе в связь между составом и свойствами многокомпонентных систем промежуточного звена – комплекса интегральных и парциальных параметров, характеризующих химическое и структурное состояние исследуемых систем. Исследование связи состав – свойства при таком подходе разделяется на две части. Первая – сводится к выбору для интересующей группы ферросплавов физико-химической модели (условий стабильности структуры), адекватно отражающих особенности их строения и специфику свойств. Вторая предусматривает установление корреляций свойств с модельными физико-химическими параметрами и использованием современных математических методов для разработки на базе этих корреляций статистических моделей, позволяющих прогнозировать свойства ферросплавов и результатов их взаимодействия.

Для численных расчетов и исследования взаимосвязи между составом, строением и свойствами расплавов ферросплавного производства предлагается использовать модель ОЦК – подобной упаковки атомов, которая ранее зарекомендовала себя весьма эффективно при решении задач подобного типа. Использование этой модели позволяет при известном составе расплава определить интегральные и парциальные модельные параметры межатомного взаимодействия. Основными из них являются химический эквивалент состава (Z^y), суммирующий информацию об эффективных зарядах компонентов с учетом вероятности образования связей разного типа и структурный параметр (d), характеризующий среднестатистическое расстояние между атомами в расплаве. По физическому смыслу каждый из этих параметров является аналогом размерного d и электронного Z^y факторов.

Используемые параметры модели характеризуют расплавы как гомогенные системы. Это допущение в известной мере идеализирует состояние их структуры. Поскольку предполагается, что обсчитываемая система является статистически однородной, отклонение от линейных зависимостей при сопоставлении параметров Z^y и d со свойствами могут рассматриваться как индикатор влияния степени микронеоднородности расплавов. Поиск путей учета влияния микронеоднородности расплавов на их свойства позволил установить, что такой учет обеспечивается за счет определения избыточных параметров (ΔZ^y) и (Δd). Эти параметры определяются как разница между Z^y и d для разупорядоченных систем и

механической смеси из исходных компонентов этой системы, т.е. $\Delta Z^y = Z_{\text{спл}}^y - \sum Z_i^y \cdot n_i$ и $\Delta d = d_{\text{спл}} - \sum d_i \cdot n_i$, где n_i – атомная доля компонента расплава. Иначе говоря, по этим параметрам оценивалась степень отличия процессов взаимодействия в расплавах, как химически единых системах от аналогичных параметров, свойственных механическим смесям. Полезность ввода таких параметров, в качестве промежуточного звена между составом и свойствами, подтвердили ранее проведенные нами исследования [9].

Большинство параметров, характеризующих свойства ферроникеля (система *Fe-Ni*), в научной литературе ограничены узкими температурными и концентрационными интервалами. Исключение составляет марка ФН-5, для конкретного состава которой имеются данные о плотности, температуре плавления, теплоёмкости, теплоте плавления, теплопроводности, и коэффициента температуропроводности [10]. Данные о свойствах остальных марок ферроникеля ограничены противоречивыми значениями по плотности и температуре плавления.

Несмотря на широкое использование в промышленности наиболее востребованных сплавов системы Fe–Ni–Cr, достаточно полные системные исследования физико-химических свойств в области жидкого состояния не проводились. В специальной литературе известны только отдельные исследования структурно-чувствительных свойств, таких как вязкость, плотность, поверхностное натяжение стали 000X18N12 промышленного производства [11], в виде зависимостей от температуры. В. И. Кашин и К.С. Филиппов [12], привели измеренные значения плотности и поверхностного натяжения жидких сплавов системы Fe–Ni–Cr при температуре, близкой к температуре плавления, и при 1600 °С. В. И. Жучковым и др. [13], изучена кинетика плавления сплавов системы Fe–Ni–Cr, содержащих, масс. %: 10 Ni; 25– 45 Cr; 2,0 C; 0,2 Si; Fe – остальное. Для рассматриваемых в работе сплавов приведены значения физико-химических и теплофизических свойств (температура кристаллизации, удельная плотность, теплоемкость, теплопроводность). Изучению температур плавления и плотности, наиболее значимых для практики никельсодержащих ферросплавов систем Fe–Ni и Fe–Ni–Si посвящены работы [14,15].

Целью работы является изучение возможности использования интегральных и парциальных модельных параметры межатомного взаимодействия для системного исследования важнейших потребительских свойств никелевых ферросплавов применяемых для легирования стали и сплавов.

Изложение основных материалов исследования.

Авторы настоящей работы, используя предложенную выше схему моделирования, и сочетание разработанных ранее критериев провели системное исследование важнейших потребительских свойств никелевых

ферросплавов применяемых для легирования стали и сплавов.

Анализ экспериментальных данных о плотности жидких и твердых сплавов железо-никель-хром [12], показал, что плотность тесно связана с параметрами межатомного взаимодействия. С учетом указанной информации и использованием экспериментальных данных в качестве реперных точек, методом корреляционно-регрессионного анализа были получены уравнения (1,2) для оценки плотности сплавов системы Fe–Ni–Cr в твердом и жидком (температура близкая к температурам ликвидуса) состояниях $D \cdot 10^3$ (г/см³):

$$D_{тв.} = 20,7 - 3,67Z^y - 3,09d + 3,74\Delta Z^y - 6,21\Delta d \quad (1);$$

$$D_{ж.} = 1,9 - 8,19Z^y + 1,03d + 2,7\Delta Z^y - 8,2\Delta d \quad (2);$$

Высокий коэффициент корреляции ($r=0,9-0,97$) плотности (D) с параметрами межатомного взаимодействия достигнут за счет ввода в уравнения избыточных параметров ΔZ^y и Δd .

На рис.1 показано соотношение экспериментальных и рассчитанных по уравнению (1) значений плотности для твердого сплава системы Fe–Ni–Cr.

Использование интегральных модельных параметров в сочетании с их избыточными значениями, позволило выразить значения температур плавления и плотности никельсодержащих ферросплавов систем Fe–Ni и Fe–Ni–Si приведенные в [2,14], как линейную функцию предлагаемых параметров.

$$T_{пл} = 9652,6 - 5396,4Z^y - 673,7d + 4267\Delta Z^y + 1022\Delta d \quad (r = 0,90) \quad (3);$$

$$D = -1,18 - 2,35Z^y + 4,16d + 2,75\Delta Z^y - 7,08\Delta d \quad (r = 0,98) \quad (4);$$

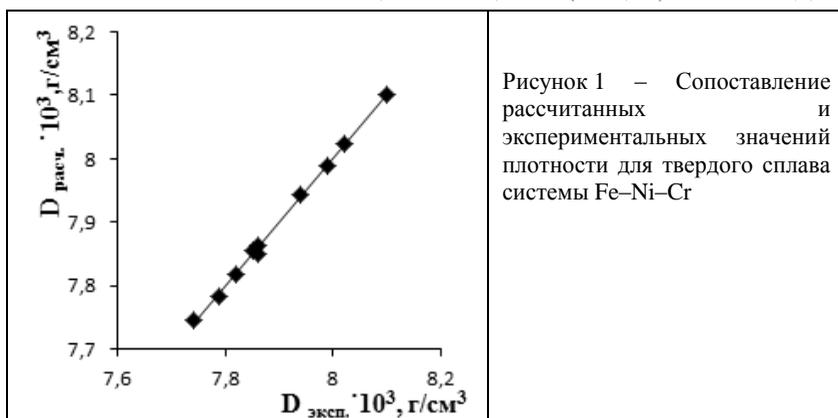


Рисунок 1 – Сопоставление рассчитанных и экспериментальных значений плотности для твердого сплава системы Fe–Ni–Cr

Дополнительные расчеты показали, что точность прогнозных моделей, при описании температуры плавления и плотности никельсодержащих ферросплавов, можно повысить путем разделения их

на группы с низким и высоким содержанием кремния и составления для каждой из них своего отдельного уравнения. В качестве примера ниже представлены подобные уравнения для ферроникеля разных марок без кремния (5,6), с содержанием кремния в пределах 1,5–5,0% (7,8) и с высоким содержанием Si –17–36% (9,10). Коэффициенты корреляции для них достигают уровня ($r = 0,98-0,99$).

Для никельсодержащих ферросплавов без Si по данным [2,14]:

$$T_{пл} = 32824 - 945Z^y - 10687d + 554\Delta Z^y - 69578\Delta d \quad r=0,99 \quad (5)$$

$$D = 25,1Z^y + 195,2d - 23,9\Delta Z^y - 126\Delta d - 572,3 \quad r=0,98 \quad (6)$$

Для низкокремнистого ферроникеля по данным [2,14]:

$$T_{пл} = 21928Z^y + 12859d - 18734\Delta Z^y - 24268\Delta d - 60098 \quad r=0,96 \quad (7)$$

$$D = 2,18 - 10,5Z^y + 6,3d + 9,4\Delta Z^y - 16,1\Delta d \quad r=0,96 \quad (8)$$

Для высококремнистого ферроникеля по данным [2,14]:

$$T_{пл} = 7904Z^y - 1049d - 6223\Delta Z^y + 1103\Delta d - 5796 \quad r=0,95 \quad (9)$$

$$D = 7,8 - 22Z^y + 11,3d + 15,2\Delta Z^y + 14,2\Delta d \quad r=0,98 \quad (10)$$

Графическая интерпретация полученных результатов представлена на рис.2.

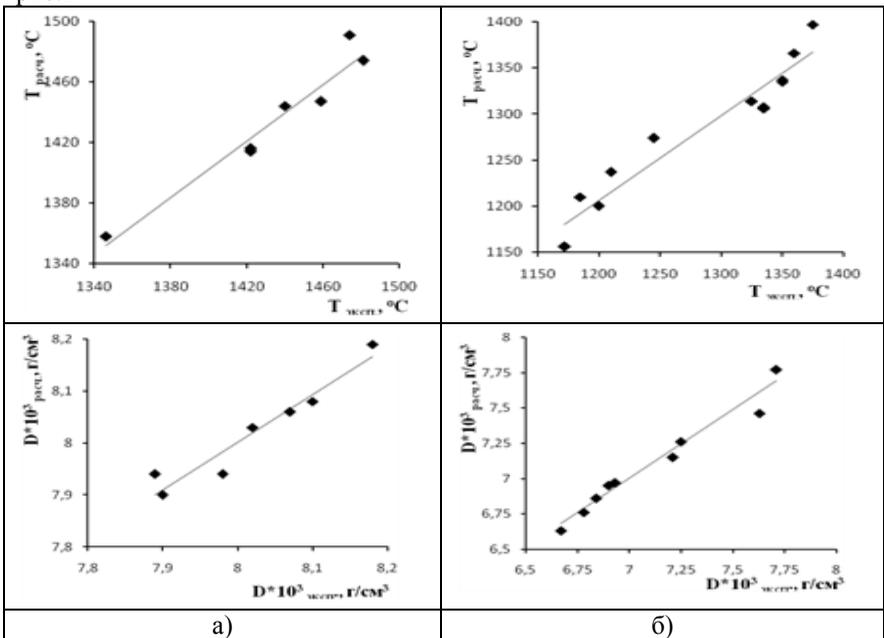


Рисунок 2 – Сопоставительное сравнение экспериментальных значений плотности и температуры плавления с расчётными значениями низкокремнистого (а) и высококремнистого (б) ферроникеля разных марок

Для иллюстрации адекватности рассчитанных результатов

соответствующим экспериментальным данным [2,14] для плотности и температуры плавления ферроникеля, в табл.1 приведены их значения.

Таблица 1. Сопоставление значений плотности и температуры плавления разных марок ферроникеля, приведенных в литературе [2, 14], с рассчитанными по уравнениям (5-8)

№ пп	Ni и Si сплаве масс. %		Интегральные параметры				Свойства	
	Ni	Si	Z^y , e	d , 10^{-1} нм	ΔZ^y , e	Δd , 10^{-1} нм	$D \cdot 10^3$,	$T_{пл}$,
							г/см ³	°C
							эксп/расч	эксп/расч
1	5,0	–	1,2197	2,8275	0,0937	-0,0015	8,00/8,01	1515/1515
2	10,0	–	1,2942	2,8277	0,1783	-0,0029	8,11/8,07	1500/1499
3	15,0	–	1,3597	2,8280	0,2539	-0,0042	8,13/8,13	1485/1485
4	25,0	–	1,4624	2,8288	0,3770	-0,0067	8,22/8,23	1465/1464
5	35,0	–	1,5266	2,8299	0,4619	-0,0089	8,31/8,31	1455/1455
6	10,0	1,9	1,3625	2,7775	0,2476	-0,0255	8,02/8,03	1481/1474
7	17,0	1,7	1,4388	2,7852	0,3378	-0,0228	8,10/8,08	1474/1491
8	26,0	1,5	1,5140	2,7925	0,4311	-0,0212	8,18/8,19	1459/1447
9	10,0	4,9	1,4540	2,7145	0,3407	-0,0468	7,90/7,90	1440/1444
10	18,0	4,7	1,5313	2,7241	0,4334	-0,0422	7,98/7,94	1422/1414
11	26,0	4,5	1,5789	2,7392	0,4965	-0,0376	8,07/8,06	1346/1358
12	3,0	21,0	1,6528	2,5187	0,5348	-0,0531	7,25/7,26	1210/1500
13	8,0	19,3	1,6760	2,5383	0,5656	-0,0518	7,63/7,46	1185/1500
14	15,0	17,0	1,7015	2,5651	0,6023	-0,0508	7,71/7,77	1172/1500
15	3,0	24,8	1,6766	2,4913	0,5603	-0,0433	6,90/6,95	1335/1500
16	9,0	25,5	1,7139	2,4927	0,6075	-0,0361	6,93/6,97	1325/1500
17	15,0	23,6	1,7360	2,5108	0,6388	-0,0371	7,21/7,15	1245/1500
18	3,0	35,9	1,6860	2,4245	0,5742	-0,0131	6,67/6,63	1375/1500
19	9,0	31,9	1,7164	2,4519	0,6122	-0,0194	6,78/6,76	1360/1500
20	15,0	32,3	1,7322	2,4527	0,6374	-0,0159	6,84/6,86	1350/1500

Учитывая ограниченность информации по теплофизическим характеристикам никельсодержащих ферросплавов, для построения прогнозных моделей авторами использовались, в качестве реперных точек, экспериментальные данные, для которых в литературе был указан химический состав (табл.2) [13].

Таблица 2. Химический состав, модельные параметры хромоникельсодержащих ферросплавов системы Fe–Ni–Cr, содержащие 2,0 %C; 0,2% Si. [13]

№	Содержание элементов, % масс.					Интегральные параметры			
	C	Ni	Cr	Si	Fe	Z^y , e	d , 10^{-1} нм	ΔZ^y , e	Δd , 10^{-1} нм
1	2,0	10,0	25,0	0,20	62,8	1,8891	2,6270	0,7028	-0,0679
2	2,0	10,0	35,0	0,20	52,8	1,9912	2,6356	0,7682	-0,0646
3	2,0	10,0	45,0	0,20	42,8	2,0441	2,6401	0,7848	-0,0654

Используя эти данные методом корреляционно-регрессионного анализа были получены уравнения для описания зависимости температуры кристаллизации (T °C), удельной плотности ($D \cdot 10^3$, г/см³), удельной теплоемкости (C_p , Дж/кг·К), теплопроводности (λ , Вт/м·К) хромоникельсодержащих ферросплавов от параметров межатомного взаимодействия в виде:

$$D = 10,65 - 1,1 Z^y + 13,3 \Delta d \quad (11)$$

$$T_{\text{сол.}} = 435,5 Z^y - 7176 \Delta d - 39,65 \quad (12)$$

$$T_{\text{лик.}} = 573,4 + 388,5 Z^y - 36,7 \Delta d \quad (13)$$

$$C_p = 468,8 + 10,1 Z^y + 0,81 d - 9,13 \Delta Z^y \quad (14)$$

$$\lambda = 35,3 + 40,7 Z^y - 41,36 \Delta Z^y \quad (15)$$

Коэффициенты корреляции между расчетными и экспериментальными значениями для этих уравнений находятся на уровне 0,99. Необходимо отметить, что прогнозная точность уравнений (11-15) достигается и с меньшим количеством интегральных параметров. В данном случае использование сочетания характеристик Z^y , ΔZ^y , Δd позволило обеспечить наиболее высокий коэффициент корреляции. Для иллюстрации адекватности расчетных результатов соответствующим экспериментальным данным в табл.3 приведены имеющиеся в [13] значения физико-химических и теплофизические свойства хромоникельсодержащих ферросплавов. Показано, что рассчитанные значения температуры ликвидус согласуются с экспериментальными данными.

Таблица 3. Сопоставление расчетных и экспериментальных физико-химических и теплофизических свойств хромоникельсодержащих ферросплавов при температуре 25°C

№ пп	Содержание, %		Ткристаллизации T , °C	Теплопроводность λ , Вт/(м·°C)	Удельная теплоемкость C_p , Дж/(кг·°C)	Удельная плотность $D \cdot 10^3$, г/см ³
	Cr	Ni				
1	25	10	1310–1270	<u>83,20</u>	<u>483,7</u>	<u>7,670</u>
			1309–1270	83,18	483,7	7,669
2	35	10	1350–1290	<u>84,60</u>	<u>484,1</u>	<u>7,601</u>
			1349–1291	84,64	484,1	7,6007
3	45	10	1370–1320	<u>86,10</u>	<u>484,5</u>	<u>7,5316</u>
			1369–1320	86,10	484,5	7,5319

*Содержание: 2,0 %C; 0,2% Si; Fe – остальное.

*Числитель и знаменатель – соответственно экспериментальные и расчетные значения

С применением экспериментальных данных [2] о теплоте плавления,

теплоемкости, теплопроводности, коэффициенте температуропроводности ферроникеля, ферробора, а также ферромолибдена, ферровольфрама, ферроциркония и др. ферросплавов были получены уравнения (16-19), позволяющие предварительно оценивать эти свойства. Следует отметить, что экспериментальные значения перечисленных параметров приведены для разных значений (100, 500 и 1000°C) температуры.

Для ферросплавов, приведенных в [2]:

$$C_p = 2140 - 200Z^y - 500d + 210\Delta Z^y - 1250\Delta d - 0,11T \quad (r=0,95) \quad (16)$$

$$\lambda = 115,9Z^y + 57,6d - 169,1\Delta Z^y - 513,3\Delta d + 0,0256T - 219,7 \quad (r=0,89) \quad (17)$$

$$\alpha \cdot 10^3 = 14,6Z^y + 22,0d - 12,7\Delta Z^y - 21,9\Delta d + 0,0025T - 58,0 \quad (r=0,94) \quad (18)$$

$$Q_{пл} = 1397 - 236,9Z^y - 289,1d + 321,6\Delta Z^y + 815,7\Delta d \quad (r=0,95) \quad (19)$$

С использованием приведенных уравнений, путем модельного прогнозирования были ориентировочно оценены температуры плавления и плотности ферроникеля (ФН-5М) производства Побужского ферроникелевого комбината с содержанием: Ni – 6,0%, Si – 0,2%, С – 0,1%, Cr– 0,242%, Со – 0,32%, Cu – 0,48%, S – 0,04%, P – 0,03%.

В табл.4 представлены расчетные физико-химические и теплофизические свойства ферроникеля марки ФН-5М.

Таблица 4. Рассчитанные физические и теплофизические свойства ферроникеля марки ФН-5М

$D \cdot 10^3$, г/см ³	$T_{пл}$, °С	C_p , Дж/(кг·°С)	Q , кДж/кг	λ , Вт/(м·°С)	$\alpha \cdot 10^{-3}$, м ² /с
7,75	1627	421(1000°С)	320	97,6(1000°С)	23,1(1000°С)

Как видно из приведенных результатов, методика, обобщающая данные для разных групп ферросплавов едина, как по сути, так и по форме.

Выводы. Разработаны полуэмпирические модели, которые позволяют прогнозировать влияние изменения состава, выраженного через интегральные параметры межатомного взаимодействия, на свойства стандартных марок ферросплавов различных групп, производимых в Украине. Они могут быть использованы для оценки свойств, как внутри отдельной марки, так и всего сортаментного ряда ферросплавов при оценке эффективности их применения на основных этапах сталеплавильного передела.

Библиографический список

1. *Ферросплавная* промышленность мира и Украины в 2014-2015 годах. /С.Г. Грищенко, В.С. Куцин, П.А.Кравченко, С.Л. Кудрявцев. // «Сучасні проблеми металургії». – Дніпропетровськ: – 2016. – том 19, вип. 1 – С.279–285.
2. *Методы* и результаты исследований физико-химических и теплофизических характеристик ферросплавов / В.И. Жучков, О.Ю. Пешуков, П.П. Орлов [и др.]. // Сб. научных трудов международной конф. «Сучасні проблеми металургії сталі». – Дніпропетровськ. – 2001. – С.211-216.
3. *Физико-химическая* оценка свойств промышленных ферросплавов / В. П. Пиптюк, А. Ф. Петров, С. В. Греков, В. А. Буршитин // Сб. научн. тр. ИЧМ НАНУ «Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии». – Днепропетровск: – 2007. – Вып.14. – С. 235–243.
4. *Приходько Э.В.* О связи между параметрами межатомного взаимодействия и характеристиками структуры расплавов / Э.В. Приходько // Расплавы. – 1990. – № 3. – С. 18–24.
5. *Приходько Э. В.* Теоретические основы физико-химических моделей структуры многокомпонентных материалов / Э.В. Приходько // Изв. АН СССР. Металлы. – 1991. – № 6. – С.208–214.
6. *Приходько Э. В.* Роль направленного межатомного взаимодействия в формировании микронеоднородного строения металлических расплавов / Э.В. Приходько, А.Ф. Петров // Изв. вузов. Черная металлургия. – 1995. – № 12. – С.5–12.
7. *Приходько Э.В.* Физико-химические критерии для оценки степени микронеоднородности металлических расплавов / Э.В. Приходько, А.Ф. Петров // Металлофизика и новейшие технологии. – 1998. – Т.20, № 7. – С. 64– 74.
8. *Петров А. Ф.* Особенности моделирования термодинамических свойств ферросплавов / А. Ф. Петров // Сб. научн. тр. ИЧМ НАНУ «Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии». – Днепропетровск: – 2003. – Вып.6. – С. 244– 250.
9. *Петров А. Ф.* Физико-химические критерии для прогнозирования термодинамических свойств многокомпонентных металлических систем / А. Ф. Петров, Э. В. Приходько, Е. Н. Ворона // Сб. научн. тр. ИЧМ НАНУ «Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии». – Днепропетровск: – 2005. – Вып.11. – С. 170–179.
10. *Комплексное* исследование свойств легирующих и микролегирующих материалов / [В.А. Вихлевщук, В.С. Игнатъев, Ю.Н. Омесь, А.В. Кекух] // Теория и практика металлургии. – 1999. – № 3. – С.29-30.
11. *Баум, Б.А.* Металлические жидкости / Б.А. Баум. – М.: Наука, 1979. – 120 с.
12. *Кашин В.И.* Плотность и поверхностное натяжение расплавов Fe-Ni-Cr / В.И.Кашин, К.С. Филиппов // Металлы. – 2004. – № 4. – С.15-19.
13. *Жучков В.И.* Изучение процесса плавления сплавов системы Fe-Ni-Cr в железоуглеродистом расплаве / В.И.Жучков, О.В. Заякин, Е.Ю. Лозовая, Д.С.Ренев // Бутлеровские сообщения. – 2016. – Т 47.– № 8. – С.56–62.

14. *Заякин О.В.* Время плавления никельсодержащих ферросплавов в стали / О.В. Заякин, В.И.Жучков, Е.Ю. Лозовая // Изв. вузов. Черная металлургия. – 2007. – № 5. – С.13-16.
15. *Жучков В.И.* Изучение температур плавления и плотности никельсодержащих ферросплавов / В.И.Жучков, О.В. Заякин, Ю.Б. Мальцев // Расплавы. – 2001. – № 1. – С.7-9.

Reference

1. Ferrosplavnaya promyshlennost' mira i Ukrainy v 2014-2015 godakh. /S.G. Grishchenko, V.S. Kutsin, P.A.Kravchenko, S.L. Kudryavtsev. // «Suchasni problemi metalurgii». – Dnipropetrovs'k: – 2016. – tom 19, vip. 1 – S.279–285.
2. Metody i rezul'taty issledovaniy fiziko-khimicheskikh i teplofizicheskikh kharakteristik ferrosplavov / V.I. Zhuchkov, O.YU. Sheshukov, P.P. Orlov [i dr.]. // Sb. nauchnykh trudov mezhdunarodnoy konf. «Suchasni problemi metalurgii stali». – Dnipropetrovs'k. – 2001. – S.211-216.
3. Fiziko-khimicheskaya otsenka svoystv promyshlennykh ferrosplavov / V. P. Piptyuk, A. F. Petrov, S. V. Grekov, V. A. Burshitin // Sb. nauchn. tr. ICHM NANU «Fundamental'nyye i prikladnyye problemy chernoy metallurgii». – Dnepropetrovsk: – 2007. – Vyp.14. – S. 235–243.
4. Prikhod'ko E.V. O svyazi mezhdru parametrami mezhatomnogo vzaimodeystviya i kharakteristikami struktury rasplavov / E.V. Prikhod'ko // Rasplavy. – 1990. – № 3. – S. 18–24.
5. Prikhod'ko E. V. Teoreticheskiye osnovy fiziko-khimicheskikh modeley struktury mnogokomponentnykh materialov / E.V. Prikhod'ko // Izv. AN SSSR. Metally. – 1991. – № 6. – S.208–214.
6. Prikhod'ko E. V. Rol' napravlennogo mezhatomnogo vzaimodeystviya v formirovani mikroneodnorodnogo stroyeniya metallicheskikh rasplavov / E.V. Prikhod'ko, A.F. Petrov // Izv. vuzov. Chernaya metallurgiya. – 1995. – № 12. – S.5–12.
7. Prikhod'ko E.V. Fiziko-khimicheskiye kriterii dlya otsenki stepeni mikroneodnorodnosti metallicheskikh rasplavov / E.V. Prikhod'ko, A.F. Petrov // Metallofizika i noveyshiye tekhnologii. – 1998. – T.20, № 7. – S. 64– 74.
8. Petrov A. F. Osobennosti modelirovaniya termodinamicheskikh svoystv ferrosplavov / A. F. Petrov // Sb. nauchn. tr. ICHM NANU «Fundamental'nyye i prikladnyye problemy chernoy metallurgii». – Dnepropetrovsk: – 2003. – Vyp.6. – S. 244– 250.
9. Petrov A. F. Fiziko-khimicheskiye kriterii dlya prognozirovaniya termodinamicheskikh svoystv mnogokomponentnykh metallicheskikh sistem / A. F. Petrov, E. V. Prikhod'ko, Ye. N. Vorona // Sb. nauchn. tr. ICHM NANU «Fundamental'nyye i prikladnyye problemy chernoy metallurgii». – Dnepropetrovsk: – 2005. – Vyp.11. – S. 170–179.
10. Kompleksnoye issledovaniye svoystv legiruyushchikh i mikrolegiruyushchikh materialov / [V.A. Vikhlevshchuk, V.S. Ignat'yev, YU.N. Omes', A.V. Kekukh] // Teoriya i praktika metallurgii. – 1999. – № 3. – S.29-30.
11. Baum, B.A. Metallicheskiye zhidkosti / B.A. Baum. – M.: Nauka, 1979. – 120 s.
12. Kashin V.I. Plotnost' i poverkhnostnoye natyazheniye rasplavov Fe-Ni-Cr / V.I.Kashin, K.S. Filippov // Metally. – 2004. – № 4. – S.15-19.

13. Zhuchkov V.I. Izucheniye protsessa plavleniya splavov sistemy Fe-Ni-Cr v zhelezouglerodistom rasplave / V.I.Zhuchkov, O.V. Zayakin, Ye.YU. Lozovaya, D.S.Renev // Butlerovskiye soobshcheniya. – 2016. – Т 47.– № 8. – S.56–62.
14. Zayakin O.V. Vremya plavleniya nikel'soderzhashchikh ferrosplavov v stali / O.V. Zayakin, V.I.Zhuchkov, Ye.YU. Lozovaya // Izv. vuzov. Chernaya metallurgiya. – 2007. – № 5. – S.13-16.
15. Zhuchkov V.I. Izucheniye temperatur plavleniya i plotnosti nikel'soderzhashchikh ferrosplavov / V.I.Zhuchkov, O.V. Zayakin, YU.B. Mal'tsev // Rasplavy. – 2001. – № 1. – S.7-9.

О. П. Петров, О. В. Кукса, Л. А. Головка, Н. Е. Ходотова

Прогнозування фізико-хімічних і теплофізичних властивостей нікелювмісних феросплавів

Метою роботи є вивчення можливості використання інтегральних і парціальних модельних параметрів міжатомної взаємодії для системного дослідження найважливіших споживчих властивостей нікелевих феросплавів, що застосовуються для легування сталі та сплавів. У роботі використаний розроблений в Інституті чорної металургії НАН України новий підхід до вирішення завдань прогнозування властивостей сплавів, що зв'язує між собою склад, структуру і властивості розплавів. Із застосуванням експериментальних даних про теплоту плавлення, теплоємності, теплопровідність, коефіцієнти температуропроводності феронікеля, ферробора, ферромолібдена, ферровольфрама, ферроцірконія та інших феросплавів було отримано рівняння, що дозволяють попередньо оцінювати ці властивості. Аналіз експериментальних даних показав, що щільність рідких і твердих сплавів залізо-нікель-хром та температури їх плавлення тісно пов'язані з параметрами міжатомної взаємодії. З використанням параметрів міжатомної взаємодії і експериментальних даних отримано рівняння для опису залежності температури кристалізації, питомої щільності, питомої теплоємності, теплопровідності хромо-нікель-содержащих феросплавів від параметрів міжатомної взаємодії. З використанням наведених рівнянь шляхом модельного прогнозування оцінено температури плавлення і щільності феронікелю (ФН-5М). Розроблені напівемпіричні моделі можуть бути використані для прогнозування властивостей стандартних марок феросплавів як всередині окремої марки, так і всього сортаментного ряду феросплавів. Це дозволяє оцінювати ефективність застосування феросплавів на основних етапах сталеплавильного переділу.

Ключові слова: феросплави, властивості, критерії, прогнозні моделі, параметри міжатомної взаємодії

A. F. Petrov, O. V. Kuksa, L. A. Golovko, N. E. Khodotova

Forecasting the physical and chemical and thermophysical properties of nickel-containing ferroalloys

The aim of the work is to study the possibility of using integral and partial model parameters of interatomic interaction for the systematic study of the most important consumer properties of nickel ferroalloys used for alloying steel and alloys. In the work, a new approach developed at the Iron and Steel Institute of the National Academy of Sciences of Ukraine was used to solve the problems of predicting the properties of

alloys, connecting the composition, structure and properties of melts. Using experimental data on the heat of melting, heat capacity, thermal conductivity, thermal diffusivity of ferronickel, ferroboron, ferromolybdenum, ferro-tungsten, ferrozirconium and other ferroalloys, equations were obtained which made it possible to estimate these properties in advance. Analysis of the experimental data showed that the density of liquid iron-nickel-chromium alloys and their melting points are closely related to the interatomic interaction parameters. Using the parameters of interatomic interaction and experimental data, equations were obtained to describe the dependence of the crystallization temperature, specific density, specific heat capacity, thermal conductivity of nickel-chromium-containing ferroalloys on the parameters of interatomic interaction. Using the above equations, model melting points and ferronickel densities (FN-5M) were estimated using model prediction. The developed semi-empirical models can be used to predict the properties of standard grades of ferroalloys both within a single grade and the entire range of ferroalloys. This allows you to evaluate the effectiveness of the use of ferroalloys at the main stages of steelmaking.

Keywords: Ferroalloys, properties, criteria, predictive models, interatomic interaction parameters

Стаття надійшла до редакції збірника 24.10.2018 року, пройшла внутрішнє і зовнішнє рецензування (Протокол засідання редакційної колегії збірника №1 від 26 грудня 2018 року)

Рецензенти: д.т.н., проф. Л.В.Камкіна, д.т.н., проф. А.ГН.Чернятевич