

**С. В. Греков**, н.с., ORCID 0000-0003-2848-0999

**Д. М. Тогобицька**, д.т.н., ORCID 0000-0001-6413-4823

**В. П. Піптюк**, к.т.н., с.н.с., ORCID 0000-0002-2915-1756,

**О. В. Кукса**, н.с.

**Ю. М. Ліхачов**, н.с.

*Інститут чорної металургії ім. З. І. Некрасова НАН України*

## **РОЗВИТОК АЛГОРИТМУ ОПИСУ МІЖАТОМНОЇ ВЗАЄМОДІЇ В РОЗПЛАВАХ НА ОСНОВІ ЗАЛІЗА З АТОМАМИ ВПРОВАДЖЕННЯ**

**Анотація.** Метою роботи є розвиток алгоритму розрахунку параметрів міжатомної взаємодії в розплавах при наявності атомів впровадження. Поряд з багаточастинними експериментальними методами дослідження, що дозволяють отримувати температурні і концентраційні залежності структурно-чутливих властивостей розплавів (щільність, в'язкість, електроопір та ін.), і з дифракційними методами дослідження (рентгено-, електронно- і нейтронोगрафія з використанням синхротронного або магнітно-гальмівного, рентгенівського випромінювання), теоретичні дослідження (методами комп'ютерного моделювання) є менш витратними та доповнюють всі інші методи досліджень. Проведений короткий аналіз аспектів сучасних квазікристалічних теорій будови металевих розплавів. Так як положення про те, що рідкі металеві матеріали мають спадкоємну структуру їх кристалічного стану, зроблений аналіз уявлень про атоми впровадження (водень, кисень, азот, бор, вуглець) для розплавів на основі заліза. Запропоновані структури елементарних комірок для гідридів, оксидів, нітридів, боридів і цементиту залізовмістких розплавів. Існуюча методика розроблена співробітниками ІЧМ НАНУ на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку, яка передбачає структуру будови металевих розплавів з упорядкуванням різних атомів по типу заміщення. Між'ядерна відстань та інші інтегральні і порційні параметри розраховуються за системою рівнянь парних взаємодій різних і однакових атомів в елементарній комірці структури у першій координаційній (ближній порядок) та другій (дальній порядок їх розташування) сферах. Виникла потреба введення додаткової (третьої) координаційної сфери взаємодії для упорядкування атомів впровадження в розплавах на основі заліза. Розроблена методика теоретичної оцінки та показана доцільність врахування відмінностей від існуючих уявлень (згідно теорії Е. В. Приходько) про структуроутворення металевих розплавів з елементами впровадження для подальшого моделювання процесів легування та мікролегування. Запропонований алгоритм перерахунку параметрів міжатомної взаємодії. Доцільність підтверджена підвищенням точності співвідношень розрахункових і експериментальних даних механічних властивостей сталей зварювального призначення.

**Ключові слова:** методика, структура, атоми заміщення і впровадження.

*«Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії». – 2021. – Випуск 35*

*«Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii». – 2021. – Vypusk 35*

*«Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy». – 2021. – Collection 35*

**Посилання на цитування:** Греков С. В., Тогобицька Д. М., Піптюк В. П., Кукса О. В., Ліхочов Ю. М. Розвиток алгоритму опису міжатомної взаємодії в розплавах на основі заліза з атомами впровадження. *Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії*. 2021. Вип. 35. С. 246-262. [in Ukrainian]. DOI 10.52150/2522-9117-2021-35-246-262

**Сучасний стан питання.** В залежності від подвійності природи рідини сформувалися дві групи теорій її побудови [1]: так звані квазігазові (температура рідини близька до кипіння) і квазікристалічні теорії. Так як в металургії рідкі метали не занадто перегріті над температурою ліквідус, то розглядалися квазікристалічні теорії побудови рідкого стану розплавів. На початку 20 століття з'явилася діркова теорія Я. І. Френкеля і Г. Ейрінга [2] (після плавлення кристалічного матеріалу зберігається властива йому решітка зі збільшенням кількості вакансій до 10%), а трохи пізніше О. І. Бачинським [3] запропонована теорія вільного об'єму (в рідині після плавлення зберігається розташування частинок, властиве кристалу, але стрибкоподібно збільшується вільний об'єм). Далі Г. Стюартом [4] розроблена теорія кластерів (передбачається, що рідина складається з мікрокристалів, упакованих так, що далекий порядок розміщення атомів неможливий). Істотні досягнення в розумінні структурних особливостей рідкого стану пов'язані з моделлю, створеною Дж. Берналом [5] в 50-і роки 20-го століття. Уявлення Бернала спираються на фундаментальні геометричні властивості тривимірних неупорядкованих випадкових комбінацій. Геометричною характеристикою будь-якого упорядкованого і неупорядкованого розташування частинок в розплаві є число сусідніх атомів (координаційне число).

Пономаренко А. Г. [6] вивчав термодинаміку взаємодіючих фаз на основі розробленої концепції колективної електронної системи хімічних елементів. Розроблена А. Г. Пономаренко теорія розплавленого шлаку як фази із колективною електронною системою передбачає, що компонентами шлаку є електронейтральні атоми хімічних елементів. Атоми різних хімічних елементів у кристалічній решітці розташовуються таким чином, що енергія їх взаємодії мінімізується. Електрони всіх атомів, що входять до складу шлаку, утворюють єдину квантово-механічну систему, яку термодинамічно можна охарактеризувати за допомогою хімічного потенціалу електронів. Це дозволяє уявити парціальну ентропію змішування у вигляді двох складових, які враховують теплове збудження ядер та електронів окремо. На основі цих положень запропоновано математичну модель для розрахунку термодинамічних характеристик шлаків.

Кожеуров В. А. [7] побудував теорію термодинамічних властивостей розплавів впровадження, яка враховує ближній порядок в розташуванні

атомів розчиненої речовини по вакансіям решітки розчинника. Середнє число пар розчиненої речовини, які займають сусідні вакансії, повинно мати відмінність від того, яке відповідало би випадковому розподілу атомів по вакансіям.

В Інституті чорної металургії ім. З. І. Некрасова НАНУ професором Приходько Е. В. розроблена [8] квазікристалічна теорія металевих розплавів на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку. Вона передбачає розташування різних атомів у вузлах квазікристалічної решітки з ОЦК-структурою згідно статистичного розподілу хімічних елементів при парній їх взаємодії. Згідно вищеназваної концепції всі різні атоми металевого розплаву утворюють розчини заміщення. У той же час в природі будови речовини існують і розчини з атомами впровадження.

**Мета роботи.** Проведення теоретичних досліджень по атомній структурі рідкого стану сплавів на основі заліза на основі існуючої концепції спрямованого хімічного зв'язку та розвиток алгоритму розрахунку параметрів міжатомної взаємодії при наявності атомів впровадження.

**Вихідні дані і методика досліджень.** У існуюче рівняння стабільності електронної будови кристалічної решітки повинні бути внесені складові, які характеризують стан речовини з атомами впровадження. Очікуване уточнення положень концепції щодо атомів впровадження у розплавах на основі заліза, ймовірно, дозволить скоригувати міжатомну відстань, а разом з нею і інтегральні, середньозважені та парціальні характеристики розплавів, які використовуються при фізико-хімічному моделюванні структурно-чутливих властивостей чавуну, сталі, феросплавів і лігатур та інших матеріалів.

Так як більшість розрахункових досліджень у металургії рідкого переділу пов'язана з доменним, сталеплавильним та феросплавним виробництвами, де вуглець є основним або легуючим елементом, а у кристалічній решітці він є елементом впровадження, дослідниками ІЧМ НАНУ запропоновано змінити алгоритм розрахунку міжатомної відстані, додавши ще інші елементи впровадження (водень, азот, кисень і бор) у розплавах на основі заліза.

**Виклад основних матеріалів дослідження.** Положення концепції спрямованого хімічного зв'язку базуються на рівнянні стабільності електронної структури, що виражена неявно системою рівнянь,  $\frac{1}{2}$ , які враховують параметри взаємодії в першій і другій координаційних сферах (1 КСВ і 2 КСВ) об'ємно-центричної квазікристалічної (ОЦК) або гранецентричної квазікристалічної (ГЦК) структури металічних розплавів. Відповідно до цієї концепції, рівняння стабільності електронної структури металічної системи описується виразом (1):

$$A \cdot Z^x(a) + B \cdot Z^y(d) = 0, \quad (1)$$

де  $A, B$  – коефіцієнти, що враховують число атомів, що знаходяться в першій (в найближчому оточенні) і в другій (в далекому оточенні) координаційній сферах взаємодії відповідно;  $Z^x(a)$  – інтегральний параметр - середньозважена сума параметрів зарядових станів хімічних елементів в ОЦК структурі, атоми яких знаходяться на відстані  $a$  в 1КСВ;  $Z^y(d)$  – інтегральний параметр - середньозважена сума параметрів зарядових станів хімічних елементів в ОЦК структурі, атоми яких знаходяться на відстані  $d$  в 2КСВ.

У виразі (1) права частина ( $= 0$ ) означає, що електрони переходять з одного атома до іншого, з однієї в іншу координаційну сферу, а два зарядових станів  $Z^x(a)$  і  $Z^y(d)$  з коефіцієнтами  $A$  і  $B$  залишаються електронейтральними згідно закону збереження енергії.

Концепція спрямованого хімічного зв'язку передбачає, що шляхом вирішення системи нелінійних рівнянь, у яких враховують міжатомну відстань  $a$  і  $d$  від заряду кожного атома, будуть визначені параметри квазікристалічної структури – кількості електронів, що беруть участь в утворенні хімічного зв'язку, і інші інтегральні і парціальні характеристики кожного елемента, які утворюють 1КСВ і 2КСВ. Тобто з точки зору формування структури рідкого розплаву всі атоми можуть заміщати один одного відповідно до їх статистичного розподілу за хімічним складом.

Крім того передбачається, що структура затверділого металу є спадковою його рідкої фази. Ряд елементів в розчинах групи заліза утворюють розчини впровадження в твердому стані і використовуються для легування і мікролегування сталі спеціального і масового призначення. З огляду на вищесказане, виникла необхідність уточнення методології та алгоритму рішення задач фізико-хімічного моделювання по концепції спрямованого хімічного зв'язку з урахуванням елементів, що утворюють розчини впровадження.

У твердих розчинах невеликі за розміром атоми неметалів статистично розміщуються в порожнечах кристалічних структур металу. Твердий розчин впровадження може утворюватися тільки тоді, коли атоми елементів, що утворюють двокомпонентну пару, значно відрізняються один від одного. У октаедричні порожнечі можуть впроваджуватися атоми згідно з правилом Хегга ( $r_x/r_{me} \leq 0,59$ , де  $r_x, r_{me}$  – радіуси атомів впровадження та основного металу). У чорній металургії основним металом є залізо ( $Fe$ ) і ін. метали підгрупи заліза, а атомами впровадження можуть бути вуглець ( $C$ ), азот ( $N$ ), бор ( $B$ ) водень ( $H$ ) і кисень ( $O$ ).

За даними [3] атоми, що володіють підвищеною в порівнянні з середньою кінетичною енергією ( $E = kT$ ) теплового руху і перевищують

енергію зв'язків атомів в решітці (в твердому стані), можуть перемішатися, утворюючи вакансії і дислокації. Кількість їх в об'ємі невелика ( $10^{-9}\%$ ) при кімнатній температурі і зростає до 1,5% при температурах, близьких до температури плавлення. Вакансії і дислоковані атоми відносяться до точкових дефектів кристалічної решітки, що приводить до її спотворення і створення напруженого стану біля дефектів. Через вакансії, що знаходяться на поверхні розділу фаз, можливе здійснення механізму впровадження елементів.

Встановлено, що геометрія іонного остову і електричний потенціал решітки при цьому спотворюються на значній відстані, що дорівнює 10 – 20 міжатомних відстаней від дефекту. Цю деформовану зону називають сферою деформації. Сфера деформації близько вакансії несе негативний заряд, так як позитивний іон заміщений вакансією (діркою). Однак електрична взаємодія вакансій на відстанях, що перевищують радіус сфери деформації  $R_{cd}$ , вельми мала.

Нами було прийнято рішення доповнити існуючий алгоритм розрахунку металевих розплавів з атомами впровадження. Додаймо до рівняння стабільності (1) ОЦК структури атомів заміщення вираз, що характеризує стабільність підструктури атомів впровадження та стабільність взаємодії двох підструктур з атомами впровадження та заміщення:

$$A \cdot Z^x(a) + B \cdot Z^y(d) + E \cdot Z^x(b) + G \cdot Z^y(c) = 0, \quad (2)$$

$E, G$  - коефіцієнти, що враховують число атомів, що знаходяться в першій (в найближчому оточенні) і в другій (в далекому оточенні) координаційних сферах взаємодії (1 КСВ і 2 КСВ) відповідно при взаємодії двох підструктур з атомами впровадження та заміщення;  $Z^x(b), Z^y(n)$  – інтегральні параметри - сума параметрів зарядових станів хімічних елементів в підрешітках атомів впровадження, які знаходяться на відстані  $b$  в 1КСВ і відстані  $c$  в 2КСВ відповідно.

В цьому разі вираз взаємодії двох підрешіток атомів впровадження та заміщення в 1КСВ (3) і у 2КСВ (4):

$$Z^x(b) = \sum E_1 \cdot x_{i,j} \cdot x_{o,p}; \quad (3)$$

$$Z^y(c) = \sum E_2 \cdot x_{i,j} \cdot x_{o,p}, \quad (4)$$

де  $x_{i,j}$  і  $x_{o,p}$  концентрація (атомні частки)  $i^{o-ro}, j^{o-ro}$  різних атомів підсистеми заміщення уздовж зв'язку  $o^{o-ro}, p^{o-ro}$  різних атомів підсистеми впровадження в 1КСВ і 2КСВ.

$$b^{i,j \neq o,p} = Ru_{i,j}^0 \cdot 10 \left( - \left( z_{min}^{i,j-o,p} + E_1 \cdot \frac{tg(\infty)_{i,j}}{tg(\infty)_i + tg(\infty)_o} \right) \cdot tg(\infty)_{i,j} \right) + Ru_{o,p}^0 \cdot 10 \left( - \left( z_{min}^{o,p-i,j} + E_1 \cdot \frac{tg(\infty)_{o,p}}{tg(\infty)_i + tg(\infty)_o} \right) \cdot tg(\infty)_{o,p} \right) \quad (5)$$

$$c^{i,j \neq o,p} = Ru_{i,j}^0 \cdot 10^{\left(-\left(z_{min}^{i,j-o,p} + E_z \cdot \frac{tg(\alpha)_{i,j}}{tg(\alpha)_i + tg(\alpha)_o}\right) \cdot tg(\alpha)_{i,j}\right)} + Ru_{o,p}^0 \cdot 10^{\left(-\left(z_{min}^{o,p-i,j} + E_z \cdot \frac{tg(\alpha)_{o,p}}{tg(\alpha)_i + tg(\alpha)_o}\right) \cdot tg(\alpha)_{o,p}\right)} \quad (6)$$

Представлені вище вирази (3) - (6) мають загальний математичний опис взаємодії систем атомів заміщення з атомами впровадження.

Структура цементиту  $Fe_3C$  авторами [9 - 11] описується по-різному в міру накоплених знань і технічних можливостей (комп'ютерного моделювання та новітніх пристроїв вимірювання між'ядерних відстаней). Так автори [12] визначили, що параметри решітки ромбічної сингонії мають параметри ( $a=4,5235$  нм,  $b=5,089$  нм,  $c=6,5373$  нм) у співвідношенні  $\approx 1:1,125:1,5$ .

Для спрощення структури ромбічної сингонії залізних розплавів з атомами впровадження і побудови алгоритму знаходження міжатомної відстані та інших параметрів металевої системи приймаємо структури, які показані на рис. 1. Лінійні параметри структур щодо параметра  $d$  (рис. 1б) нами приймаються такими, які приблизно відповідають параметрам решітки твердого  $Fe_3C$  (до евтектики на діаграмі  $Fe-Fe_3C$  2,14% C – для подвійних і далі систем). Структура стовпчастих боридів приймається в односпрямованій по відношенню атома впровадження бору підструктурою (рис. 1в). Така структура застосовується і для гідридів заліза. Кубічна структура (типу NaCl) нітридів і оксидів приймається згідно рис. 1г. Атоми заміщення мають структуру (рис. 1а).

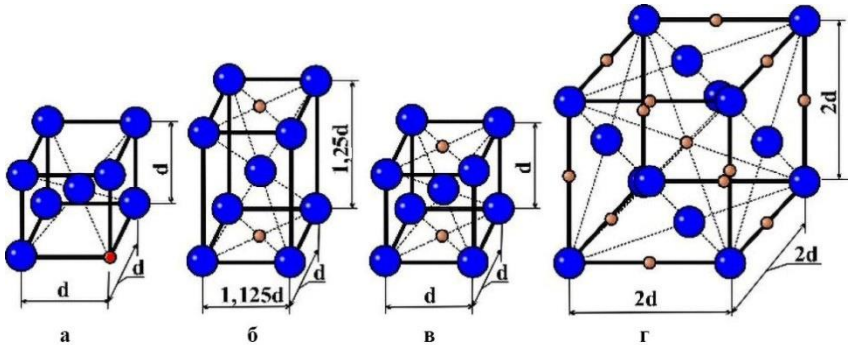


Рисунок 1 – Прийняті структури атомів впровадження для фериту, доевтектоїдних і заевтектоїдних сталей - (б), боридів, гідридів - (в), для нітридів, оксидів - (г). Цифри над лініями зі стрілками - прийняті лінійні параметри структур щодо параметру  $d$ . Великими кульками показані атоми заліза, малими – атоми впровадження (крім 1а – атоми заміщення).

Приймаємо, що металева система має особливу кластерну будову, тобто в одній і тій же елементарній комірниці не може бути різних атомів впровадження, а атом впровадження оточують тільки атоми заліза.

Визначаємо відстані  $b$ ,  $c$  щодо відстані  $d$ , а також інтегральні параметри  $Z^X$  і  $Z^Y$  для прийнятих структур в 1КСВ і в 2КСВ.

Рівняння стабільності залізних розплавів з атомами впровадження і заміщення має такий остаточний вигляд (7):

$$\begin{aligned}
 & A \cdot Z_{\text{Fe}1-i,j}^x \left[ \frac{1}{2} \sqrt{3} \cdot d \right] + B \cdot Z_{\text{Fe}1-i,j}^y [d] + C1 \cdot Z_{\text{Fe}2-\text{Fe}2}^y [d] + \\
 & + C1 \cdot Z_{\text{Fe}2-\text{Fe}2}^y [1,125 \cdot d] + C1 \cdot Z_{\text{Fe}2-\text{Fe}2}^y [1,5 \cdot d] + D1 \cdot \\
 & \cdot Z_{\text{Fe}2-\text{Fe}2}^x \left[ \frac{1}{2} \sqrt{1^2 + 1,125^2 + 1,5^2} \cdot d \right] + C2 \cdot Z_{\text{Fe}2-c}^x \left[ \frac{1}{2} \sqrt{1^2 + 1,125^2} \cdot d \right] + \\
 & + D2 \cdot Z_{\text{Fe}2-c}^y [0,75 \cdot d] + 4 \cdot Z_{C-c}^z \left[ \sqrt{1^2 + 1,125^2} \cdot d \right] + A \cdot Z_{\text{Fe}3-\text{Fe}3}^y [d] + \\
 & + B \cdot Z_{\text{Fe}3-\text{Fe}3}^x \left[ \frac{1}{2} \sqrt{3} \cdot d \right] + C3 \cdot Z_{\text{Fe}3-b}^x \left[ \frac{1}{2} \sqrt{2} \cdot d \right] + D3 \cdot Z_{\text{Fe}3-b}^y [0,5 \cdot d] + \\
 & + 4 \cdot Z_{B-b}^z \left[ \sqrt{2} \cdot d \right] + C4 \cdot Z_{\text{Fe}3-h}^x \left[ \frac{1}{2} \sqrt{2} \cdot d \right] + D4 \cdot Z_{\text{Fe}3-h}^y [0,5 \cdot d] + \\
 & + 4 \cdot Z_{H-h}^z \left[ \sqrt{2} \cdot d \right] + E1 \cdot Z_{\text{Fe}4-o, \text{Fe}4-n}^x [d] + G1 \cdot Z_{\text{Fe}4-\text{Fe}4}^y \left[ \sqrt{2} \cdot d \right] + \\
 & + G2 \cdot Z_{O-o}^y \left[ \sqrt{2} \cdot d \right] + G3 \cdot Z_{N-n}^y \left[ \sqrt{2} \cdot d \right] = 0 \quad (7)
 \end{aligned}$$

де вираз в [...] – між'ядерні відстані (відносно  $d$ ), на яких знаходяться атоми елементів заміщення і/або впровадження у структурі 1КСВ, 2КС і 3КСВ;

$A, B, C1, C2, C3, C4, D1, D2, D3, D4, E1, G1, G2, G3$  - коефіцієнти, що враховують число атомів, що знаходяться в 1 КСВ, 2 КСВ та 3 КСВ відповідно для різних між'ядерних відстаней;

нижні індекси Fe1, Fe2, Fe3 і Fe4 – кількість атомів заліза у атомній комірниці розплаву, які відповідають хімічній формулі або оточують атоми впровадження;

$A \cdot Z_{\text{Fe}1-i,j}^x \left[ \frac{1}{2} \sqrt{3} \cdot d \right] + B \cdot Z_{\text{Fe}1-i,j}^y [d]$  – часткова сума рівняння стабільності з ОЦК структурою матриці основи, яка включає тільки атоми заміщення в 1 КСВ і 2КСВ;

$C1 \cdot Z_{\text{Fe}2-\text{Fe}2}^y [1,125 \cdot d] + C1 \cdot Z_{\text{Fe}2-\text{Fe}2}^y [1,5 \cdot d] + D1 \cdot$   
 $\cdot Z_{\text{Fe}2-\text{Fe}2}^x \left[ \frac{1}{2} \sqrt{1^2 + 1,125^2 + 1,5^2} \cdot d \right] + C2 \cdot Z_{\text{Fe}2-c}^x \left[ \frac{1}{2} \sqrt{1^2 + 1,125^2} \cdot d \right] + D2 \cdot$   
 $\cdot Z_{\text{Fe}2-c}^y [0,75 \cdot d] + 4 \cdot Z_{C-c}^z \left[ \sqrt{1^2 + 1,125^2} \cdot d \right]$  – часткова сума рівняння стабільності для випадку зі структурою Fe<sub>3</sub>C (рис. 16) в 1КСВ, 2КСВ і прийнята нами 3КСВ ( $Z_{C-c}^z \left[ \sqrt{1^2 + 1,125^2} \cdot d \right]$ ) – сума кількості загальних

електронів уздовж атомного зв'язку між двома атомами вуглецю, розташованих на відстані  $\sqrt{1^2 + 1,125^2} \cdot d$  у площині решітки зі сторонами  $d$  і  $1,125 d$  по діагоналі;

$A \cdot Z_{Fe3-Fe3}^y[d] + B \cdot Z_{Fe3-Fe3}^x \left[ \frac{1}{2} \sqrt{3} \cdot d \right] + C3 \cdot Z_{Fe3-B}^x \left[ \frac{1}{2} \sqrt{2} \cdot d \right] + D3 \cdot Z_{Fe3-B}^y[0,5 \cdot d] + 4 \cdot Z_{B-B}^z[\sqrt{2} \cdot d] + C4 \cdot Z_{Fe3-H}^x \left[ \frac{1}{2} \sqrt{2} \cdot d \right] + D4 \cdot Z_{Fe3-H}^y[0,5 \cdot d] + 4 \cdot Z_{H-H}^z[\sqrt{2} \cdot d]$  – часткова сума рівняння стабільності для випадку зі структурою (рис. 1в) в 1КСВ, 2КСВ і прийнята нами 3КСВ ( $Z_{B-B}^z[\sqrt{2} \cdot d]$ ) – сума кількості загальних електронів уздовж атомного зв'язку між двома атомами бору або/і водню, розташованих на відстані  $\sqrt{2} \cdot d$  у площині решітки по діагоналі в 3КСВ, відповідно як у цементиті;

$E1 \cdot Z_{Fe4-O, Fe4-N}^x[d] + G1 \cdot Z_{Fe4-Fe4}^y[\sqrt{2} \cdot d] + G2 \cdot Z_{O-O}^y[\sqrt{2} \cdot d] + G3 \cdot Z_{N-N}^y[\sqrt{2} \cdot d]$  – часткова сума рівняння стабільності для випадку зі структурою (рис. 1г) в 1КСВ, 2КСВ.

Кількість атомів заліза в 3 рази більше атомів вуглецю, тобто відповідає формулі ( $Fe_3C$ ) до змісту вуглецю рівного 2,14%, а решта заліза і вуглецю (для чавунів) відповідає решітці ОЦК, при цьому останній є атомом заміщення. Приймаємо відстань між атомами заліза найменшої сторони  $d$ , інші сторони рівні  $1,125 d$  і  $1,5 d$ .

Нехай в металевій системі є хімічні елементи в підсистемі атомів заміщення ( $Fe, i, j$ ) і впровадження ( $C, B, H, O, N$ ). Перепишемо (2) у вигляді (8):

$$Z_i^{sr} \cdot x_i + Z_j^{sr} \cdot x_j + Z_o^{sr} \cdot x_o + Z_p^{sr} \cdot x_p = 0, \quad (8)$$

де  $Z_i^{sr}, Z_j^{sr}, Z_o^{sr}, Z_p^{sr}$  – середній заряд  $i$ -ого,  $j$ -ого різних атомів підсистеми заміщення уздовж зв'язку  $o$ -ого,  $p$ -ого різних атомів підсистеми впровадження в 1КСВ і 2КСВ;  $x_i, x_j, x_o, x_p$  – атомні частки елементів.

Середні заряди вищевказаної системи обчислюємо за формулою (9):

$$Z_i^{sr} = \left\{ \frac{Z_{i-i}^{par1} \cdot x_i + Z_{i-j}^{par1} \cdot x_j}{A} + \frac{Z_{i-o}^{par1} \cdot x_o + Z_{i-p}^{par1} \cdot x_p}{E} \right\} + \left\{ \frac{Z_{i-i}^{par2} \cdot x_i + Z_{i-j}^{par2} \cdot x_j}{B} + \frac{Z_{i-o}^{par2} \cdot x_o + Z_{i-p}^{par2} \cdot x_p}{G} \right\} \quad (9)$$

де  $Z_{i-i}^{par1}, Z_{i-j}^{par1}, Z_{i-o}^{par1}, Z_{i-p}^{par1}, Z_{j-i}^{par1}, Z_{j-j}^{par1}, Z_{j-p}^{par1}, Z_{j-o}^{par1}, Z_{o-o}^{par1}, Z_{o-p}^{par1}, Z_{o-i}^{par1}, Z_{o-j}^{par1}, Z_{p-p}^{par1}, Z_{p-o}^{par1}, Z_{p-i}^{par1}, Z_{p-j}^{par1}$  – парціальні заряди першого в нижньому регістрі елемента уздовж зв'язку другого елемента в 1КСВ;

$Z_{i-i}^{par2}, Z_{i-j}^{par2}, Z_{i-o}^{par2}, Z_{i-p}^{par2}, Z_{j-i}^{par2}, Z_{j-j}^{par2}, Z_{j-p}^{par2}, Z_{j-o}^{par2}, Z_{o-o}^{par2}, Z_{o-p}^{par2},$



$Z_{o-i}^{par2}$ ,  $Z_{o-j}^{par2}$ ,  $Z_{p-p}^{par2}$ ,  $Z_{p-o}^{par2}$ ,  $Z_{p-i}^{par2}$ ,  $Z_{p-j}^{par2}$  – парціальні заряди першого в нижньому регістрі елемента уздовж зв'язку другого елемента в 2КСВ.

У формулах (9) в {...} дужках вказано середній заряд в 1 КСВ, а в ( ) – у 2КСВ.

Перепишемо формули (9) у вигляді (10), згрупувавши по однаковому парному зв'язку:

$$Z_i^{sr} = \left[ \frac{Z_{i-i}^{par1}}{A} + \frac{Z_{i-i}^{par2}}{B} \right] \cdot x_i + \left[ \frac{Z_{i-j}^{par1}}{A} + \frac{Z_{i-j}^{par2}}{B} \right] \cdot x_j + \left[ \frac{Z_{i-o}^{par1}}{E} + \frac{Z_{i-o}^{par2}}{G} \right] \cdot x_o + \left[ \frac{Z_{i-p}^{par1}}{E} + \frac{Z_{i-p}^{par2}}{G} \right] \cdot x_p. \quad (10)$$

Назвемо вираз в [...] дужках парціальним зарядом вздовж атомного зв'язку (першого елемента в нижньому індексі щодо другого елемента) і перепишемо рівняння (10) у вигляді (11):

$$Z_i^{sr} = Z_{i-i}^{par i} \cdot x_i + Z_{i-j}^{par i} \cdot x_j + Z_{i-o}^{par i} \cdot x_o + Z_{i-p}^{par i} \cdot x_p. \quad (11)$$

Парціальні заряди для однакових атомів, щодо міжатомної відстані  $a$ ,  $b$  і  $d$ ,  $c$ , представлені в рівнянні (12), а для різних-в рівнянні (13) відповідно для 1КСВ і 2КСВ:

$$Z_{i,j=o,p}^{par1,2} = E_1^{i,j=o,p} = \lg \frac{2 \cdot Ru_{i,j,o,p}^0}{a,d,m,n} / tg(\alpha)_{i,j,o,p}; \quad (12)$$

$$Z_{i,j \neq o,p}^{par1,2} = -(Z_{min}^{i,j \neq o,p} + E_{1,2}^{i,j \neq o,p} \cdot \frac{tg(\alpha)_{i,j,o,p}}{tg(\alpha)_{i,j+o,p}}) \cdot tg(\alpha)_{i,j,o,p}, \quad (13)$$

де  $tg(\alpha)_{i,j+o,p}$  – сума  $tg(\alpha)_{i,j,o,p}$  елементів, що приймали участь в утворенні зв'язку атомної пари.

Спрямована зарядова щільність визначається за рівнянням (14) [8]:

$$\rho_r = \lim_{\substack{\Delta z \rightarrow 0, \\ \Delta R \rightarrow 0}} Ru^{z+\Delta z} = \frac{dz}{dr} = Ru^z \cdot \frac{\Delta z}{Ru^{z+\Delta z} - Ru^z} \quad (14)$$

Об'ємна зарядова щільність визначається за рівнянням (15) [8]:

$$\rho_V = \lim_{\substack{\Delta z \rightarrow 0, \\ \Delta V \rightarrow 0}} Ru^{z+\Delta z} = \frac{dz}{dV} = Ru^z \cdot \frac{\Delta z}{4/3 \cdot \pi \cdot ((Ru^{z+\Delta z})^3 - (Ru^z)^3)} \quad (15)$$

Градієнт приросту атомного радіусу системи  $tg(\alpha)$  дорівнює:

$$tg(\alpha) = \sum_{n=1}^{n=s} x_n \cdot tg(\alpha_n), \quad (16)$$

де  $s$  – кількість атомів в системі,  $x_n$  - атомні частки,  $tg(\alpha_n)$  – кут нахилу лінії тренду, що показує збільшення атомного радіусу при зміні заряду іона на 1 електрон кожного елемента.

Для перевірки доцільності подальшого застосування вдосконаленого алгоритму розв'язання системи нелінійних рівнянь за концепцією спрямованого хімічного зв'язку виконали декілька розрахунків в середовищі «PTC MathCad Prime», яке застосовує матричне обчислення, з точністю до  $10^{-8}$  і з застосуванням розробленої в ІЧМ НАНУ програми «Metal». Доцільність будь-яких теоретичних розробок (у тому числі при фізико-хімічному моделюванні металургійних процесів) оцінювали статистичними методами порівняння відповідних розрахункових результатів, які базуються на засадах квазікристалічної побудови структури металевих розплавів з атомами заміщення і впровадження.

В якості вихідних даних обрано хімічний склад розплавів потрібних систем Fe-Me-H (Me = Ni, Cr, Nb, Zr, Ti, Ta, C, B, Mo, W, Si), де водень, а також вуглець та бор виступають атомами впровадження, і розраховані відповідні структурні параметри по попереднім алгоритмам [15].

По результатам розрахунків ( $n=40$ ) для різних алгоритмів стосовно вищезазначених металевих систем отримані наступні рівняння та коефіцієнти множинної регресії: по існуючому алгоритму (попередні) – рівняння (17), по запропонованому алгоритму (нові) – рівняння (18).

$$[H], \text{ см}^3/100 \text{ г} = -380,866 + 95,167d + 16,059Z^Y + 1358,491tga \quad r=0,848 \quad (17)$$

$$[H], \text{ см}^3/100 \text{ г} = -158,754 + 66,514d + 146,374Z^Y_{B+H} + 45,361tga \quad r=0,943 \quad (18)$$

Оцінена середня відносна похибка відхилення експериментальних даних від розрахункових, отриманих в різні часи для потрібних систем Fe-Me-H. Вона складає 11,92% для запропонованого алгоритму розрахунків параметрів розплавів з атомами впровадження проти 23,26% – для існуючого алгоритму.

Розрахунки також продовжені по вивченню розчинності водню при різних температурах для більш складних металевих систем на основі заліза. Результати розрахунків по двом алгоритмам представлені у табл. 1 і на рис. 2.

Таблиця 1 – Хімічний вміст елементів розплавів та параметри розрахунків

Вміст, %	$H \cdot 10^4$ , %	$t$ , °C	Існуючий алгоритм			Запропонований алгоритм		
			$d \cdot 10^{-1}$ , нм	$ Z^Y $ , e	$tga$	$d \cdot 10^{-1}$ , нм	$tga$	$ Z^Y_{H+B} $ , e
3C 2,9Si 0,88Cr 93,22Fe	7,1	1300	2,4345	1,4242	0,0916	2,4287	0,091659	1,95E-07
1,37Si 59Cr 39,63Fe	31,7	1600	2,8133	2,0182	0,0749	2,7092	0,074990	8,84E-06

Продовження табл. 1

Вміст, %	$H \cdot 10^4$ , %	$t$ , °C	Існуючий алгоритм			Запропонований алгоритм		
			$d \cdot 10^{-1}$ , нм	$ Z^y $ , e	$tga$	$d \cdot 10^{-1}$ , нм	$tga$	$ Z^y_{H+B} $ , e
1,37Si 59Cr 39,63Fe	34,9	1700	2,8133	2,0182	0,0749	2,7092	0,075000	1,072E-05
5,76Si 1,88Cr 3,77Ni 88,59Fe	20,66	1600	2,6988	1,4508	0,0886	2,6076	0,088673	5,61E-06
4,62Si 1,91Cr 3,82Ni 89,65Fe	22,23	1600	2,7176	1,4197	0,0885	2,6289	0,088581	2,63E-06
1,8Si 1,96Cr 3,93Ni 92,31Fe	25,05	1600	2,7785	1,3309	0,0884	2,6876	0,088449	5,31E-06
0,8Si 1,98Cr 3,97Ni 93,25Fe	25,84	1600	2,8043	1,2954	0,0883	2,7124	0,088397	6,19E-06
1,8Cr 3,6Ni 10,2Co 84,58Fe	22,57	1600	2,8322	1,419	0,0891	2,7404	0,089194	6,02E-06
27,5Ni 12,1Mo 60,4Fe	23,6	1600	2,8513	1,7004	0,0911	2,7609	0,091168	7,89E-06
33,7Ni 3Co 9,6Mo 53,7Fe	21,2	1600	2,848	1,7186	0,0931	2,7572	0,093180	7,68E-06
1,89Cr 3,79Ni 5,35W 88,97Fe	23,66	1600	2,8366	1,3238	0,0877	2,7440	0,087759	7,03E-06
1,95Cr 3,91Ni 2,33W 91,81Fe	24,84	1600	2,8312	1,2904	0,0880	2,7389	0,088102	7,22E-06
1,98Cr 3,96Ni 1,07W 92,99Fe	25,21	1600	2,829	1,2769	0,0882	2,7364	0,088239	7,23E-06
1,82Cr 3,64Ni 8,92Nb 85,62Fe	26,94	1600	2,8712	1,4195	0,0869	2,7544	0,087743	9,07E-06
1,65Cr 3,3Ni 17,4Nb 77,65Fe	29,21	1600	2,9067	1,5602	0,0854	2,7547	0,087749	1,067E-05
1,91Cr 3,82Ni 4,42Ta 89,85Fe	24,52	1600	2,8395	1,3081	0,0879	2,7468	0,087956	7,51E-06
1,93Cr 3,83Ni 3,64Zr 90,6Fe	28,67	1600	2,8573	1,3191	0,0880	2,7641	0,088036	1,064E-05
1,89Cr 3,78Ni 15,75Zr 78,58Fe	24,3	1600	2,9446	1,5035	0,0869	2,8492	0,086921	1,12E-05
1,69Cr 3,37Ni 15,75Zr 79,19Fe	39,13	1600	2,9455	1,4917	0,0868	2,8504	0,086930	2,907E-05
1,78Cr 3,55Ni 11,2Ti 83,47Fe	42,04	1600	2,9028	1,4980	0,0870	2,8035	0,087973	2,508E-05

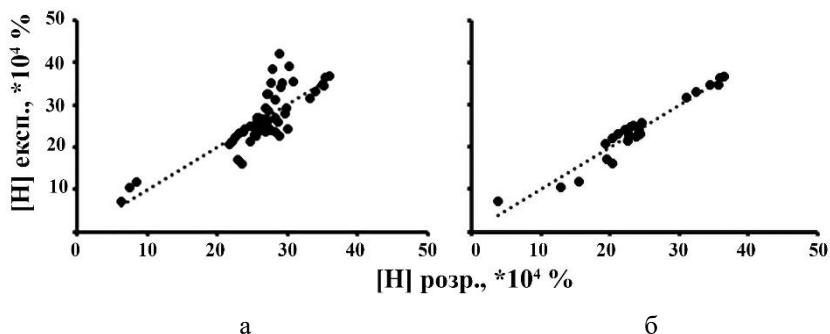


Рисунок 2 – Зіставлення експериментальної та розрахункової розчинності водню у розплаві при різних температурах для існуючого (а) і запропонованого (б) алгоритмів [15].

Отримані також рівняння (19) і (20) для існуючого і запропонованого алгоритмів розчинності водню у металевих багатокомпонентних розплавах на основі заліза при різних температурах з середньою відносною похибкою 10,37% і 7,44% відповідно (n=65):

$$[H], *10^4 \% = -19,805 + 29,654d - 3,345Z^Y - 720,792tg\alpha + 0,0189t \quad r=0,810 \quad (19)$$

$$[H], *10^4 \% = -25,612 - 10,193d + 963053Z^Y_{H} + 0,925tg\alpha + 0,0446t \quad r=0,931 \quad (20)$$

Нижче представлені дані для сталі зварювального призначення [16], хімічний склад якої та механічні властивості дроту після волочіння наведені у табл. 2, а розрахункові результати – у табл. 3.

Таблиця 2 – Хімічний склад\* та якісні показники дроту із сталі зварювального призначення дослідницьких плавок

Номер плавки	Вміст елементів, %							Механічні властивості	
	C	Mn	Si	P	S	Cu	B/N	$\sigma_b$ , Н/мм <sup>2</sup>	$\psi$ , %
1	0,08	1,98	0,74	0,014	0,016	0,18	1,42	550	65
2	0,06	1,85	0,78	0,010	0,006	0,15	1,10	510	71
3	0,07	1,83	0,79	0,009	0,004	0,14	1,08	580	66
4	0,07	1,80	0,72	0,009	0,009	0,13	1,06	510	77
5	0,08	1,80	0,74	0,010	0,006	0,15	0,88	530	71

\*У хімічному складі сталі марки Св-08Г2С згідно ГОСТ 2246-70 для зварювального дроту присутні хром і нікель у кількості, яка не перевищує 0,35% їх загального вмісту разом з міддю.

Таблиця 3 – Результати розрахунків досліджень за існуючим та запропонованим алгоритмами для сталі зварювального призначення.

Номер плавки	Існуючий алгоритм			Запропонований алгоритм		
	$d \cdot 10^{-1}$ , нм	$Z^Y$ , e	$tga$	$d \cdot 10^{-1}$ , нм	$tga$	$Z^Y_{B \times 10^7}$ , e
1	2,7946	1,2283	0,08814	2,7167	0,08813	2,83
2	2,7968	1,2250	0,08809	2,7156	0,08809	2,17
3	2,7945	1,2255	0,08812	2,7150	0,08819	4,73
4	2,7968	1,2212	0,08811	2,7173	0,08811	2,10
5	2,7946	1,2235	0,08812	2,7166	0,08812	2,54

На рис. 3 представлені залежності тимчасового опору ( $\sigma_b$ , Н/мм<sup>2</sup>) від хімічного еквіваленту ( $Z^Y_B$ ) в матриці розплаву з елементом впровадження – бором, який застосовується для мікролегування сталі зварювального призначення (рис. 3).

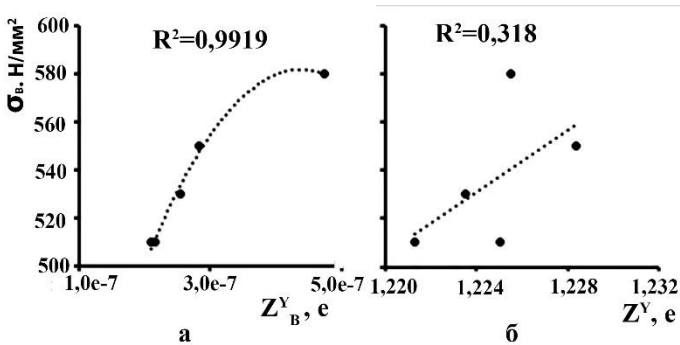


Рисунок 3 – Залежність тимчасового опору  $\sigma_b$  від хімічного еквіваленту  $Z^Y_B$  – матриці з елементом впровадження – бором і матриці основи  $Z^Y$  для розрахунків за запропонованим (а) і існуючим (б) алгоритмами.

Вирішення доцільності використання уточнень концепції спрямованого хімічного зв'язку стосовно розплавів на основі заліза з атомами впровадження знаходиться в стадії додаткової перевірки відповідними розрахунками по мірі поповнення інформаційного ресурсу та удосконалення існуючих алгоритмів у Відділі фізико-хімічних проблем металургії Інституту і включає створення нової версії програмного забезпечення.

### Висновки

Вдосконалено алгоритм розрахунку параметрів міжатомної взаємодії на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку в розплавах на основі заліза з урахуванням атомів впровадження (H, B, C, N, O).

Розроблено алгоритмічне забезпечення в середовищі «PTC Mathcad Prime» для проведення чисельних досліджень по вивченню структурного стану розплавів з утворенням розчинів впровадження при кристалізації.

Підвищення точності прогнозних моделей розчинності водню у розплавах на основі заліза та механічних властивостей в сталях зварювального призначення показує доцільність розвитку алгоритму моделювання структури залізних розплавів з атомами впровадження, зокрема при їх мікролегуванні бором, розчинності в них газів та вуглецю в порівнянні з раніше розробленим алгоритмом моделювання структури металевих розплавів на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку по принципу заміщення атомів.

### Перелік посилань

1. Жукова Л. А. Строение металлических жидкостей : учебное пособие. Екатеринбург : УГТУ-УПИ, 2002. 46 с.
2. Френкель Я. И. Введение в теорию металлов. Москва : Государственное издательство физико-математической литературы. 1958. 368 с.
3. Бачинский О. И. О зависимости внутреннего трения жидкостей от их химической природы. Приложения к протоколу Московского общества испытателей природы (МОИП). 1900. № 7. 120 с.
4. Stewart G.W. X-ray diffraction in liquids. *Reviews of Modern Physics*. 1930. Vol. 2. № 1. P. 116-122.
5. Бернал Дж. Д. *Успехи химии*. 1961. Т. 30. С. 1312-1323.
6. Пономаренко А. Г. Вопросы термодинамики фаз переменного состава, имеющих коллективную электронную систему. *Журнал физической химии*. 1974. Т. 48. Вып. 7. С. 1668-1671.
7. Кожеуров В. А. К термодинамике растворов внедрения. *Известия ВУЗов. Черная металлургия*. 1965. № 2. С. 10-16.
8. Приходько Э. В. Металлохимия многокомпонентных систем. Москва : Металлургия. 1995. 320 с.
9. Фазы и структуры на диаграмме железо – цементит : веб-сайт. URL: [https://studopedia.ru/3\\_165562\\_fazi-i-strukturi-na-diagramme-sostoyaniya-zhelezo-tsementit.html](https://studopedia.ru/3_165562_fazi-i-strukturi-na-diagramme-sostoyaniya-zhelezo-tsementit.html)
10. Строение металлургических сплавов : веб-сайт. URL: <https://studfiles.net/preview/2532146/>
11. Цементит в углеродистых сталях: коллектив. монография (под ред. В. М. Счастливецва). Екатеринбург : Издательство УМЦ УПИ, 2017. 380 с.
12. Самсонов Г. В., Винницкий И. М. Тугоплавкие соединения (справочник). 2-е издание. Москва : Металлургия, 1976. 560 с.
13. Игнатъев В. С., Вихлевшук В. А., Черногрицкий В. М., Пиптюк В. П. Изучение свойств ферросплавов и лигатур для микролегирования и раскисления стали. *Изв. вузов. Черная металлургия*. 1988. № 6. С. 37-42.
14. Вихлевшук В. А., Игнатъев В. С., Омесь Ю. Н. Комплексное исследование свойств легирующих и микролегирующих материалов. *Теория и практика*

металлургии. 1999. № 3. С. 29-30.

15. Голованенко С. А., Зикеев В. Н., Серебряная Е. Б. Влияние легирующих элементов и структуры на сопротивление конструкционных сталей водородному охрупчиванию. *Металловедение и термическая обработка металлов*. 1978. № 1. С. 2-14.
16. Парусов В. В., Сычков А. Б., Чуйко И. Н. Влияние химического состава на структуру, свойства и технологическую пластичность катанки сварочного назначения из стали Св-08ГНМ. *Теория и практика металлургии*. 2009. № 1-2. С. 98–102.

### References

1. Zhukova L.A. (2002). *Stroenie metallicheskih zhidkostei. Uchebnoe posobie [The structure of metallic liquids: a tutorial]*. Ekaterinburg: UGTU-UPI. 2002. 46p. [in Russian].
2. Frenkel Ya.I. (1958). *Vvedenie v teoriyu metallov. Gosudarstvennoe izdatelstvo fiziko-matematicheskoi literatury [Introduction to the theory of metals]*. Moskva: State publishing house of physical and mathematical literature. 1958. 368p. [in Russian].
3. 3.Bachiskii O.I. (1900). *O zavisimosti vnutrennego treniya zhidkostey ot ih himscheskoy prirody [On the dependence of the internal friction of liquids on their chemical nature]*. Prilozheniya k protokolu Moskovskogo obshchestva ispytaniy prirody (MOIP) [Appendices to the protocol of the Moscow Society for Nature Testing]. 1900, Vol. 7, 120. [in Russian].
4. Stewart G.W. (1930). X-ray diffraction in liquids. *Reviews of Modern Physics, 1930, Vol. 2, 1, 116-122*.
5. Bernal Dzh D. (1961). *Uspehi himii. [Advances in chemistry], 1961, Vol. 30, 1312-1323*. [in Russian].
6. Ponomarenko A.G. (1974). Voprosy termodinamiki faz peremennogo sostava, imeyushchih kollektivnyuyu elektronnyuyu sistemu [Questions of thermodynamics of phases of variable composition with a collective electronic system]. *Zhurnal fizicheskoi himii [Journal of Physical Chemistry], 1974, Vol. 48, 7, 1668-1671*. [in Russian].
7. Kozheurov V.A. (1965). K termodinamike rastvora vnedreniya. [On the thermodynamics of interstitial solutions]. *Izvestiya VUZov. Chornaya metallurgiya [Izvestiya VUZov. Ferrous metallurgy], 1965, 2, 10-16* [in Russian]
8. Prihodko Ye.V. (1995). *Metallohimiya mnogokomponentnyh system. [Metal chemistry of multicomponent systems]*. Metallurgiya [Metallurgy], 1995, 320 p. [in Russian].
9. Fazi-i-strukturi-na-diagramme-sostoyaniya-zhelezo-tsementit [Phases and structures on the iron-cementite phase diagram]. Retrieved from [https://studopedia.ru/3\\_165562](https://studopedia.ru/3_165562) [in Russian].
10. Stroenie metallicheskih splavov [The structure of metal alloys] Retrieved from <https://studfiles.net/preview/2532146/>. [in Russian].
11. Tsementit v uglerodistyh stal'yah. (2017). [Cementite in carbon steels] Schaclitvsev V.M. (Ed.). Ekaterinburg, UMTs UPI. [in Russian].

12. Samsonov G.V., Vinnitskii I.M. (1976). *Tugoplavkie soedineniya [Refractory compounds]*. (2nd ed.). Metallurgiya [Metallurgy], 1976. 560p [in Russian].
13. Ignatev V.S., Vihlevshchuk V.A., Chernogritskii V.M., Piptyuk V.P. (1988). Izuchenie svoystv ferrosplavov i ligature dlya mikrolegirovaniya i raskisleniya stali. [Study of the properties of ferroalloys and master alloys for microalloying and deoxidizing steel]. *Izvestiya VUZov. Chornaya metallurgiya [Izvestiya VUZov. Ferrous metallurgy]*, 1988, 6, 37-42. [in Russian].
14. Vihlevshchuk V.A., Ignatev V.S., Omes Yu.N. (1999). Kompleksnoe issledovanie svoystv legiruyushchih i mikrolegirushchih materialov. [Comprehensive study of the properties of alloying and microalloying materials] *Teoriya i praktika metallurgii [Theory and practice of metallurgy]*, 1999, 3, 29-30. [in Russian].
15. Golovanenko S.A., Zikeev V.N., Serebryannaya E.B. (1978) Vliyanie legiruyushchih yelementov i struktury na soprotivlenie konstruksionnyh staley vodorodnomu ohrupchivaniyu. [Influence of alloying elements and structure on the resistance of structural steels to hydrogen embrittlement.] *Metallovedenie i termicheskaya obrabotka metallov [Metallurgy and heat treatment of metals]*, 1978, 1, 2-14. [in Russian]. <https://doi.org/10.1007/BF00670433>
16. Parusov V.V., Sychov A.B., Chuyko I.N. (2009). Vliyanie himicheskogo sostava na strukturu, svoystva i tehnologicheskuyu plastichnost katanki svarochnogo naznacheniya iz stali Sv-08GNM. [Influence of the chemical composition on the structure, properties and technological plasticity of wire rod for welding purposes from steel Sv-08GNM]. *Teoriya i praktika metallurgii [Theory and practice of metallurgy]*, 2009, 1-2, 98-102. [in Russian].

**S. V. Grekov**, Researcher, ORCID 0000-0003-2848-0999

**D. N. Togobitskaya**, Dr. Sci., Senior Researcher, Professor, ORCID 0000-0001-6413-4823

**V. P. Piptyuk**, Ph.D., Senior Researcher, ORCID 0000-0002-2915-1756

**O. V. Kuksa**, Ph.D., Researcher

**Yu. M. Lyhochov**, Ph.D., Researcher

*Iron and Steel Institute of Z. I. Nekrasov National Academy of Sciences of Ukraine*

## **DEVELOPMENT OF ALGORITHM FOR DESCRIPTION OF INTERATOMIC INTERACTION IN IRON-BASED MELTINGS WITH IMPLEMENTATION ATOMS**

**Summary.** The aim of this work is to develop an algorithm for calculating the parameters of interatomic interaction in melts in the presence of introduction atoms. Along with high-cost research methods, which make it possible to obtain temperature and concentration dependences of the structure-sensitive properties of melts (density, viscosity, electrical resistance, etc.), and with diffraction methods of research (X-ray, electron and neutronography using synchrotron or magnetic-brake, X-ray radiation) theoretical research (using computer modeling methods) is less expensive and

«Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії». – 2021. – Випуск 35  
«Fundamental'nye i prikladnye problemy černoj metallurgii». – 2021. – Vypusk 35  
«Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy». – 2021. – Collection 35



complements other research methods. Conducting a short analysis of aspects of modern quasicrystalline theories of the structure of metallic melts. Since the proposition that liquid metal materials have a hereditary structure of their crystalline state, an analysis of the concepts of interstitial atoms (hydrogen, oxygen, nitrogen, boron, carbon) for iron-based melts is made. The proposed structures of unit cells for hydrides, oxides, nitrides, borides and cementite of iron-containing melts. The existing methodology was developed by the employees of the ISI NASU on the basis of the concept of directed chemical bonding, which assumes the structure of the structure of metal melts with the composition of various atoms by the type of substitution. The internuclear distance and other integral and portion parameters are calculated using the system of equations for pair interactions of different and identical atoms in the unit cell of the structure in the first coordination (short-range order) and second (long-range order of their arrangement) spheres. The need arose to introduce an additional (third) coordination sphere of interaction for ordering interstitial atoms in iron-based melts. A method of theoretical assessment has been developed and the expediency of taking into account the differences from the existing concepts (according to the theory of Ye.V. Prikhodko) on the structure formation of metal melts with intrusion elements for further modeling of alloying and microalloying processes is shown. An algorithm for recalculating the parameters of interatomic interaction is proposed. The expediency is confirmed by an increase in the accuracy of the ratio of calculated and experimental data on the mechanical properties of steels for welding purposes.

**Key words:** technique, structure, substitution and introduction atoms.

**For citation:** Grekov S.V., Togobytskaya D.M., Piptyuk V.P., Kuksa O.V., Lihochov Yu.M. Rozvytok alorytmu opysu mizhatomnoi vzaimodii v rospлавah na osnovi zaliza z atomami vprovadzheniya [Development of algorithm for description of interatomic interaction in iron-based meltings with implementation atoms]. *Fundamentalni i prikladni problemy chornoj metalurgii* [Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy], 2021, 35, 246-262. [in Ukrainian]. DOI 10.52150/2522-9117-2021-35-246-262

*Стаття надійшла до редакції збірника 24.09.21 року,  
пройшла внутрішнє і зовнішнє рецензування  
(Протокол засідання редакційної колегії  
збірника №4 від 22 грудня 2021 року)*