

УДК 669.168:669.15-198

Д. М. Тогобицька¹, д.т.н., проф., пров.н.с., ORCID 0000-0001-6413-4823О. В. Кукса¹, к.т.н., н.с., ORCID 0000-0002-6268-0692С. В. Греков¹, н.с., ORCID 0000-0003-2849-0999І. Р. Поворотня¹, к.т.н., н.с., ORCID 0000-0001-5872-7403Ю. М. Ліхачев¹, н.с., ORCID 0000-0003-3168-7813Н. Е. Ходотова¹, м.н.с., ORCID 0000-0002-6958-4636¹ *Інститут чорної металургії ім. З. І. Некрасова НАН України*

ПРОГНОЗУВАННЯ ТЕПЛОФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ХРОМОВІСНИХ ФЕРОСПЛАВІВ

Анотація. Метою роботи є розробка прогнозних моделей теплофізичних властивостей хромовісних феросплавів. В Інституті чорної металургії НАН України ведуться системні дослідження фізико-хімічних та теплофізичних властивостей феросплавів із їх моделюванням. З використанням створеної бази «Феросплави» в статті представлені прогнозні моделі теплофізичних властивостей хромовісних феросплавів для моделювання процесів взаємодії феросплавів з рідкою сталлю. Фізико-хімічна модель структуризації металевого розплаву базується на використанні параметрів міжатомної взаємодії. Металевий розплав розглядається як хімічно єдина система, на основі концепції спрямованого зв'язку, що розроблена Приходько Є.В. та застосування факторного аналізу для генерації моделей оптимальної структури. Прогнозні моделі теплофізичних властивостей хромовісних феросплавів розроблено в інтервалі 0,027–8,5% С і 29,2 – 72,7% Cr, що маю вид: $T_{\text{солідус}}, T_{\text{ліквідус}}, \rho = f(d, Z^Y)$. Аналіз експериментальних даних теплофізичних властивостей хромовісних феросплавів показав тісний зв'язок з параметрами міжатомної взаємодії. Розроблені моделі дають змогу прогнозувати вплив зміни складу, вираженого в інтегральних параметрах міжатомної взаємодії, на властивості хромовісних феросплавів. Вони можуть бути використані для оцінки властивостей як усередині окремої марки, так і всього сортаментного ряду хромовісних феросплавів.

Ключові слова: феросплави, ферохром, прогнозування, властивості, параметри міжатомної взаємодії.

Посилання для цитування: Прогнозування теплофізичних властивостей хромовісних феросплавів / Д. М. Тогобицька, О. В. Кукса, С. В. Греков, І. Р. Поворотня, Ю. М. Ліхачев, Н. Е. Ходотова // *Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії*. 2023. Вип. 37. С. 287-294. <https://doi.org/10.52150/2522-9117-2023-37-287-294>

Сучасний стан питання. Оптимізація процесів легування і доведення металу за хімічним складом нерозривно пов'язана з вивченням закономірностей кінетики плавлення, розчинення та засвоєння елементів з феросплавів та сплавів, що вводяться. Знання

фізико-хімічних та теплофізичних властивостей феросплавів, у тому числі дорогих та імпортованих, дозволяє забезпечити можливість підвищення ефективності їх застосування, а також прогнозувати склади феросплавів з оптимальними характеристиками. Експериментальне визначення властивостей феросплавів дуже проблематичне і дороге, тому особливий науковий та практичний інтерес становлять розрахункові методи визначення властивостей феросплавів.

В Інституті чорної металургії НАН України ведуться системні дослідження фізико-хімічних та теплофізичних властивостей феросплавів із їх моделюванням [1-9]. Створено інформаційну базу феросплавів широкого сортаменту «Феросплави», що включає дані про виробництво, хімічний склад, найважливіші теплофізичні, фізико-хімічні та фізико-механічні властивості феросплавів широкого сортаменту (ферохрому, феросиліція, феромарганця, феррованадія, феротитану, фероніобія, феронікелю, фероцирконію, феромолібдену, силікокальцію, силікомарганцю, феросилікоцирконію та ряду інших). Систематизована інформація використовується при розробці прогнозних моделей властивостей феросплавів, при математичному, фізико-хімічному та фізичному моделюванні процесів, що протікають при взаємодії феросплавів із рідкою сталлю. Слід зазначити, що створена база даних охоплює експериментальні дослідження в ретроспективі більше 50 років. Приклад фрагменту документу з бази «Феросплави» приведено нижче (рис. 1).

Мета роботи: розробка прогнозних моделей теплофізичних властивостей хромовмісних феросплавів.

Виклад основних результатів дослідження

Слід зауважити, що на теплофізичні властивості хромовмісних феросплавів великий вплив має вміст вуглецю, тому після експертної оцінки експериментальних даних ми охопили хромовмісні феросплави з інтервалом 0,027– 8,5% С. Відповідно вміст хрому з інтервалом 29,2 – 72,7. Вплив інших елементів на властивості феросплавів значно нижче.

Наші прогнозні моделі базуються на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку [10-12]. Основні положення фізико-хімічної моделі структуризації металевого розплаву передбачають використання параметрів міжатомної взаємодії: середня між'ядерна відстань – d (10^{-1} нм); градієнт зміни радіуса іона за зміни його заряду – $tg\alpha$; фізико-хімічний еквівалент зарядового стану – Z^Y (e), а також параметр спрямованої зарядової щільності – ρ_l .

Документ №19;

кс = феррохром, плотность, температура ликвидус, температура солидус, эвтектика;
авторы = Ермаченков В.А., Островский О.И., Григорян В.А., Островский Я.И., Кулинич В.И., Вундер А.Ю., Нарыжный В.Д.;

название = Теплофизические свойства промышленных марок феррохрома;

издание = Изв. ВУЗов. Черная металлургия. № 9. 1980;

реферат = Проведено исследование плотности ряда марок феррохрома в жидком и твердом состоянии;

методика = Использован метод проникающего гамма-излучения. Погрешность определения температур ликвидус и солидус $\pm 10-15$ °С;

количество образцов = 12.

#Теплофизические свойства ферросплавов: (12,10)										
Номер сплава	C	Si	Cr	P	S	ts	tL	ρ_S	ρ_L	
1	0.027	0.7	72.5	0.02		1570	1670	6.83	6.49	
2	0.05	0.7	70.8	0.02		1570	1670	6.81	6.43	
3	0.14	0.6	72.7	0.03		1550	1650	6.82	6.5	
4	0.22	0.9	71.1	0.03		1560	1675	6.74	6.42	
5	0.27	1	71.6	0.03		1500	1645	6.66	6.32	
6	1	1.4	71.2	0.03		1360	1585	6.85	6.45	
7	1.2	1.5	70.6	0.03		1355	1560	6.88	6.47	

Рисунок 1 – Фрагмент документу у базі «Феросплави»: хімічний склад – мас.%, t_s – температура солидус, °С, t_L – температура ліквідус, °С, ρ_S – густина у твердому стані, г/см³, ρ_L – густина в рідкому стані, г/см³. Наведено ізотерми густини ферохрому при 1700 °С і вплив вуглецю на t_s і t_L .

У табл. 1 приведено фрагмент даних хімічного складу хромовмісних феросплавів, що досліджені Григоряном В. А. та розраховані нами відповідно їх інтегральні параметри.

Таблиця 1 – Хімічний склад та інтегральні параметри хромовмісних феросплавів [13].

№	Cr	C	Si	Mn	P	$d_{10^{-1}HM}$	Z^Y_e	tga
1	39,4	0,2	2,3	24,4		2,793	2,182	0,0782
2	38,3	0,1	15,9	17,8		2,637	2,189	0,0804
3	38,4	0,1	10,4	22,3		2,696	2,207	0,0795
4	34,6	0,2	9,5	20,1		2,695	2,187	0,0804
5	72,5	0,027	0,7		0,02	2,812	1,939	0,0719
6	70,8	0,05	0,7		0,02	2,809	1,953	0,0723
7	72,7	0,14	0,6		0,03	2,802	1,938	0,0721
8	71,1	0,22	0,9		0,03	2,788	1,957	0,0726
9	71,6	0,27	1		0,03	2,782	1,956	0,0726
10	70,8	2,9	0,2			2,578	1,981	0,0771

Вважаючи на те, що інтегральні параметри міжатомної взаємодії розраховуються з врахуванням впливу всіх складових елементів феросплавів, адекватність прогнозних моделей (рис. 1) достатня для практичного використання:

$$T_{\text{солідус}}, \text{ } ^\circ\text{C} = 1424,076 + 520,73 d - 681,58 Z^Y \quad (r = 0,96); \quad (1)$$

$$T_{\text{ліквідус}}, \text{ } ^\circ\text{C} = 2103,77 + 466,88 d - 899,79 Z^Y \quad (r = 0,94). \quad (2)$$

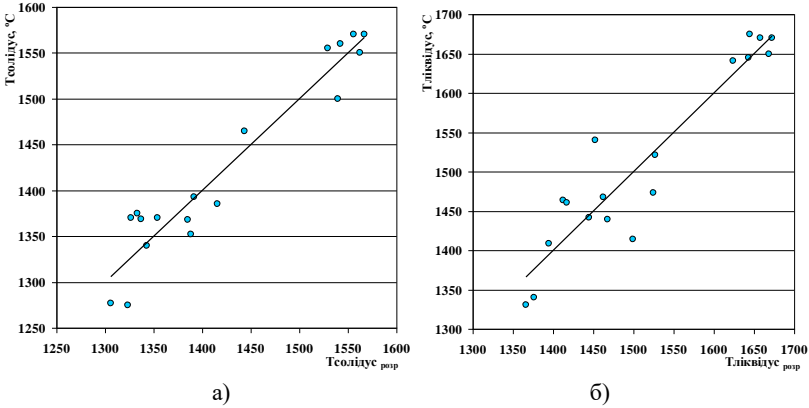


Рисунок 2 – Порівняльний аналіз розрахункових та експериментальних значень: а) $T_{\text{солідус}}$, б) $T_{\text{ліквідус}}$.

У табл. 2 приведено експериментальні і розрахункові значення властивостей хромовмісних феросплавів та відносна похибка δX , % відповідно до даних у табл. 1:

Таблиця 2 – Експериментальні і розрахункові значення властивостей хромовмісних феросплавів та відносна похибка δX , %.

№	$T_{\text{солідус}},$ $^\circ\text{C}$	$T_{\text{солідус розр}},$ $^\circ\text{C}$	$\delta X,$ %	$T_{\text{ліквідус}},$ $^\circ\text{C}$	$T_{\text{ліквідус розр}},$ $^\circ\text{C}$	$\delta X,$ %
1	1393	1391,8	0,09	1442	1445,0	0,21
2	1277	1305,8	2,25	1331	1365,9	2,62
3	1275	1323,5	3,81	1340	1376,3	2,71
4	1369	1337,0	2,34	1409	1394,3	1,04
5	1570	1567,1	0,18	1670	1672,3	0,14
6	1570	1555,7	0,91	1670	1657,9	0,72
7	1550	1562,4	0,80	1650	1668,2	1,11
8	1560	1542,2	1,14	1675	1644,6	1,81
9	1500	1539,7	2,65	1645	1642,9	0,13
10	1385	1415,8	2,22	1473	1524,3	3,48

Також для щільності (ρ , г/см³) хромовмісних феросплавів у рідкому стані (при $T_{\text{ліквідус}}$) розроблена прогнозна модель (рис. 2):

$$\rho, \text{ г/см}^3 = -7,288 + 2,8075 d + 3,0476 Z^Y \quad (r = 0,97). \quad (3)$$

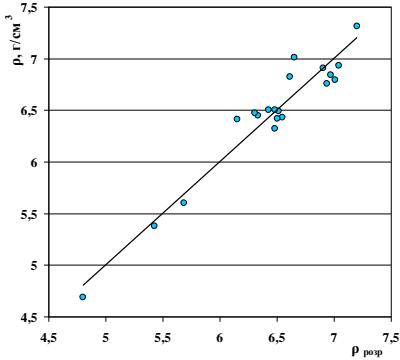


Рисунок 2 – Порівняльний аналіз розрахункових та експериментальних значень щільності, г/см³.

Необхідно зазначити, що інтегральний параметр $\text{tg}\alpha$ є вагомим для властивостей феросплавів. Наприклад, $\text{tg}\alpha$ дає змогу описати питомий електроопір (ρ , Ом·м) нелінійною степеневою залежністю (рис. 3а) з точністю $r = 0,92$:

$$\rho, \text{ Ом}\cdot\text{м} = 5\text{E}^{+09} \text{tg}\alpha^{8,5368}. \quad (4)$$

Для питомої електропровідності (σ , 10^{-5} См/м (Сіменс/метр)) аналогічно збудува залежність з точністю $r = 0,91$ (рис. 3б):

$$\sigma, 10^{-5} \text{ См/м} = 62,286 - 687,91 \text{tg}\alpha. \quad (5)$$

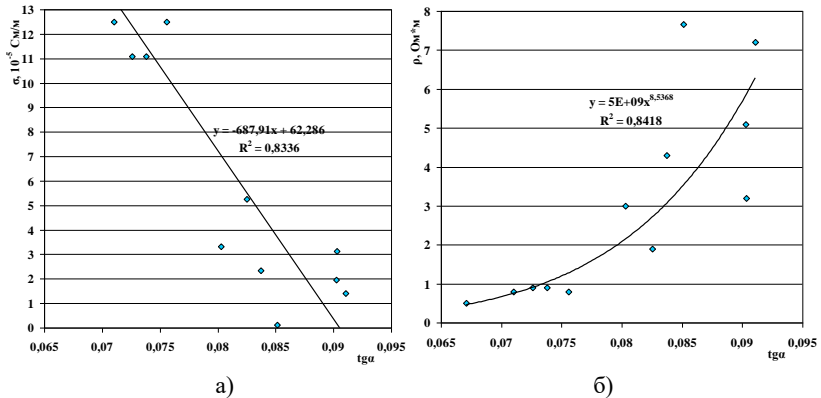


Рисунок 3 – Залежність а) питомого електроопору (ρ , Ом·м) і б) питомої електропровідності (σ , 10^{-5} См/м) від параметра міжатомної взаємодії $\text{tg}\alpha$.

Висновки

Аналіз накопичених в базі «Феросплави» експериментальних даних теплофізичних властивостей хромовмісних феросплавів показав тісний зв'язок з параметрами міжатомної взаємодії. Розроблені моделі охоплюють хромовмісні феросплави в інтервалі 0,027–8,5% С і 29,2 –

72,7% Cr та дають змогу прогнозувати вплив зміни складу, що закодований у інтегральних параметрах міжатомної взаємодії, на властивості хромовмісних феросплавів. Розроблені моделі рекомендуються для використання при оцінці властивостей, як усередині окремої марки, так і всього сортаментного ряду хромовмісних феросплавів.

Перелік посилань

1. Базы данных и модели для экспертной оценки эффективности использования ферросплавов при производстве стали / Д. Н. Тогобицкая, В. П. Пиптюк, А. Ф. Петров, С. В. Греков, И. Р. Снигура, Ю. М. Лихачев, Л. А. Головки // *Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии*. 2017. Вып. 31. С. 150-165.
2. Физико-химическая оценка свойств промышленных ферросплавов / В. П. Пиптюк, А. Ф. Петров, С. В. Греков и др. // *Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии*. 2007. Вып. 14. С. 235–243.
3. Приходько Э. В., Петров А. Ф. Методика прогнозирования физических и теплофизических свойств марганцевых ферросплавов в зависимости от состава. *Металлургическая и горнорудная промышленность*. 2008. №6. С. 27–30.
4. Прогнозирование свойств стандартных марганец- и кремнийсодержащих ферросплавов / В. П. Пиптюк, А. Ф. Петров, С. В. Греков и др. // *Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии*. 2008. Вып. 17. С. 218–230.
5. Петров А. Ф., Приходько Э. В., Кукса О. В. Прогнозирование физико-химических и теплофизических свойств ферросиликомарганца стандартных марок. *Сборник материалов VII международной научно-технической конференции «Ключевые аспекты развития электрометаллургии»*. 2016. Т. 19, Вып. 1. С. 171 – 175.
6. Прогнозирование физико-химических и теплофизических свойств борсодержащих ферросплавов / А. Ф. Петров, О. В. Кукса, Л. А. Головки, С. В. Греков // *Сборник материалов международной научно-технической конференции "Информационные технологии в металлургии и машиностроении"*. Днепропетровск, 2016. С. 44-49.
7. Петров А. Ф., Кукса О. В., Головки Л. А., Ходотова Н. Е. Прогнозирование физико-химических характеристик никельсодержащих ферросплавов. *Тезисы на конф. Университетская наука – 2017*, с. 53-54.
8. Прогнозирование физико-химических и теплофизических свойств феррониобия стандартных марок / А. Ф. Петров, О. В. Кукса, Л. А. Головки, Н. Е. Ходотова // *Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии*. 2017. Вып. 31. С. 260-265.
9. Петров А. Ф., Кукса О. В., Головки Л. А. Модельное прогнозирование физических свойств силикокальция стандартных марок. *«Литье. Металлургия-2019»*
10. Приходько Э. В. *Эффективность комплексного легирования стали и сплавов*. Киев : Наукова думка, 1995. 292 с.
11. Приходько Э. В. *Металлохимия многокомпонентных систем*. М. : Металлургия, 1995. 320 с.
12. Приходько Э. В., Петров А. Ф. Физико-химические критерии для

оценки степени микронеоднородности металлических расплавов. *Металлофизика и новейшие технологии*. 1998.–Т. 20, № 7. С. 64–74.

13. Теплофизические свойства промышленных марок феррохрома / В. А. Ермаченков, О. И. Островский, В. А. Григорян, Я. И. Островский, В. И. Кулинич, А. Ю. Вундер, В. Д. Нарыжный // *Изв. ВУЗов. Черная металлургия*. 1980. № 9.

References

1. Togobitckaia, D. N., Piptiuk, V. P., Petrov, A. F., Grekov, S. V., Snigura, I. R., Likhachev, Iu. M., Golovko, L. A. (2017). Bazy dannykh i modeli dlia ekspertnoi otcenki effektivnosti ispolzovaniia ferrosplavov pri proizvodstve stali. *Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy*, 31, 150–165

2. Piptiuk, V. P., Petrov, A. F., Grekov, S. V. et al. (2007). Fiziko-khimicheskaia otsenka svoistv promyshlennykh ferrosplavov. *Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy*, 14, 235–243

3. Prikhodko, E. V., & Petrov, A. F. (2008). Metodika prognozirovaniia fizicheskikh i teplofizicheskikh svoistv margantsevykh ferrosplavov v zavisimosti ot sostava. *Metallurgicheskaiia i gornorudnaia promyshlennost*, (6), 27–30

4. Piptiuk V. P., Petrov A. F., Grekov S. V. et al. (2008). Prognozirovanie svoistv standartnykh marganec- i kremniisoderzhashchikh ferrosplavov. *Fundamentalnye i prikladnye problemy chernoii metallurgii*, 17, 218–230

5. Petrov, A. F., Prikhodko, E. V., & Kuksa, O. V. (2016). Prognozirovanie fiziko-khimicheskikh i teplofizicheskikh svoistv ferrosilikomargantca standartnykh marok. *Sbornik materialov VII mezhdunarodnoi nauchno-tekhnicheskoi konferentsii "Kliuchevye aspekty razvitiia elektrometallurgii"*, 19(1), pp. 171–175

6. Petrov, A. F., Kuksa, O. V., Golovko, L. A., & Grekov, S. V. (2016). Prognozirovanie fiziko-khimicheskikh i teplofizicheskikh svoistv borsoderzhashchikh ferrosplavov. *Sbornik materialov mezhdunarodnoi nauchno-tekhnicheskoi konferentsii "Informatsionnye tekhnologii v metallurgii i mashinostroenii"*. Dnepropetrovsk, 2016. pp. 44–49

7. Petrov, A. F., Kuksa, O. V., Golovko, L. A., & Khodotova, N. E. (2017). Prognozirovanie fiziko-khimicheskikh kharakteristik nikelsoderzhashchikh ferrosplavov. *Tezisy konf. "Universitetskaia nauka-2017"*, pp. 53–54

8. Petrov, A. F., Kuksa, O. V., Golovko, L. A., & Khodotova, N. E. (2017). Prognozirovanie fiziko-khimicheskikh i teplofizicheskikh svoistv ferroniobiia standartnykh marok. *Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy*, 31, 260–265

9. Petrov, A. F., Kuksa, O. V., & Golovko, L. A. (2019). Modelnoe prognozirovanie fizicheskikh svoistv silikokaltsiia standartnykh marok. *"Lite. Metallurgiiia-2019"*

10. Prikhodko, E. V. (1995). *Effektivnost kompleksnogo legirovaniia stali i splavov*. Naukova dumka

11. Prikhodko, E. V. (1995). *Metallokhiimiia mnogokomponentnykh sistem*. Metallurgiiia

12. Prikhodko, E. V., & Petrov, A. F. (1998). Fiziko-khimicheskie kriterii dlia otcenki stepeni mикронеоднородности metallicheskh raspлавov. *Metallofizika i noveishie tekhnologii*, 20(7), 64–74

13. Ermachenkov, V. A., Ostrovskii, O. I., Grigorian, V. A., Ostrovskii, Ia. I.,

Kulinich, V. I., Vunder, A. Iu., & Naryzhnyi, V. D. (1980). Teplofizicheskie svoistva promyshlennykh marok ferrokroma. *Izv. VUZov. Chernaia metallurgii*, (9)

D. M. Togobitskaya¹, D. Sc. (Tech.), Professor, Leading Researcher, ORCID 0000-0001-6413-4823

O. V. Kuksa¹, Ph. D. (Tech.), Researcher, ORCID 0000-0002-6268-0692

S. V. Grekov¹, Researcher, ORCID 0000-0003-2849-0999

I. R. Povоротnia¹, Ph. D. (Tech.), Researcher, ORCID 0000-0001-5872-7403

Yu. M. Likhachev¹, Researcher, ORCID 0000-0003-3168-7813

N. Ye. Khodotova¹, Junior Researcher, ORCID 0000-0002-6958-4636

¹ *Iron and Steel Institute of Z. I. Nekrasov National Academy of Sciences of Ukraine*

THE PREDICTION OF THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF CHROME-CONTAINING FERROALLOYS

Abstract. The purpose of the work is to develop predictive models of thermophysical properties of chromium-containing ferroalloys. The Institute of Ferrous Metallurgy of the National Academy of Sciences of Ukraine conducts systematic studies of the physicochemical and thermophysical properties of ferroalloys with their modeling. With the use of the created "Ferosplav" database, the article presents predictive models of thermophysical properties of chromium-containing ferroalloys for modeling the processes of interaction of ferroalloys with liquid steel. The physicochemical model of metal melt structuring is based on the use of interatomic interaction parameters. The metal melt is considered as a chemically unified system, and factor analysis with the generation of models of the optimal structure. Predictive models of thermophysical properties of chromium-containing ferroalloys were developed with an interval of 0.027–8.5% C and 29.2–72.7% Cr: T_{solidus} , T_{liquidus} , $\rho = f(d, Z^Y)$. The analysis of experimental data on the thermophysical properties of chromium-containing ferroalloys showed a close relationship with the parameters of interatomic interaction. The developed models make it possible to predict the effect of composition changes, expressed through integral parameters of interatomic interaction, on the properties of chromium-containing ferroalloys with an interval of 0,027-8,5% C and 29,2 – 72,7% Cr. They can be used to assess the properties of both a single grade and the entire range of chromium-containing ferroalloys.

Key words: ferroalloys, ferrochromium, prediction, properties, parameters of interatomic interaction.

For citation: Togobitskaya, D. M., Kuksa, O. V., Grekov, S. V., Povоротnia, I. R., Lihachov, Y. M., & Hodotova, N. E. (2023). The prediction of thermophysical properties of chrome-containing ferroalloys. *Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy*, 37, 287-294. <https://doi.org/10.52150/2522-9117-2023-37-287-294>

*Стаття надійшла до редакції збірника 25.10.2023 р.
Рекомендовано до друку редколегією збірника (Протокол № 9 від 19.12.2023 р.)*