

ХІМІЧНА РІВНОВАГА В СИСТЕМІ Fe–O–H
ЗА ВИСОКИХ ТЕМПЕРАТУРМ.М. Гасик^{1,2}, М.І. Гасик²¹Аалто Університет, 00076, м. Аалто, Еспоо, Фінляндія. E-mail: michael.gasik@aalto.fi²Національна металургійна академія України. 49000, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 4

Розглянуто питання термодинамічної рівноваги в системі Fe–O–H за температур сталеплавильних процесів (1600 °C). Проаналізовано масив історичних даних, особливості експериментів щодо їх отримання і їх недоліки. Проведено новий більш коректний розрахунок концентрацій водню та кисню в рідкому залізі і в газовій фазі. Розраховані нові коефіцієнти активності, які походять з точних термодинамічних принципів, на відміну від раніш використаних штучних моделей на базі параметрів взаємодії. Бібліогр. 19, рис. 6.

Ключові слова: термодинаміка; залізо; водень; кисень; розчини; активність; рівновага

Взаємодія в системі Fe–O–H разом з системою Fe–O–C є фундаментальною у виробництві сталі [1–3]. Ця система досліджена вельми детально для умов відновлення оксидів заліза у твердій фазі і менш детально — для взаємодії рідкого заліза з газовою фазою. В останньому випадку більшість відомих фундаментальних досліджень була спрямована або на визначення розчинності водню в рідкому залізі, або ж розчинності кисню за допомоги газової суміші H₂O–H₂ [3]. Незважаючи на важливість даних взаємодії в цій системі, в літературі практично немає детальної діаграми фазової рівноваги при високих температурах (наприклад 1600 °C) і узгоджених даних щодо активностей водню і кисню, коли вони присутні в рідкому залізі одночасно. Більшість даних (отриманих у минулому сторіччі) використовують штучні спрощені моделі розчинів з використанням параметрів взаємодії, які не мають відповідної і ґрунтовної термодинамічної бази [2–4]. Відмінності в попередніх експериментах і застосованих у ті часи аналітичних методах не дозволяють побудувати відповідні фазові діаграми на підставі таких даних.

З метою розробки термодинамічно обґрунтованого підходу до рівноваги в цій системі в роботі проаналізовано існуючі дані стосовно концентрацій водню і кисню в рідкому залізі, проведено нові розрахунки і побудовано відповідні діаграми.

Відомі експериментальні дані. Одним із перших досліджень розчинності водню і кисню в залізі були роботи Гамільтона та Вечера [5, 6]. Вони використовували газопарову суміш H₂O–H₂ як допоміжну для вивчення розчинності кисню паралельно із дослідженням рівноваги системи Fe–O–C. Також зробили перші виміри вмісту водню і прийшли до висновку, що його кількість досить незначна і не впливає на вміст кисню. Порівняно

з вимірами, зробленими на 30–40 років пізніше, зрозуміло, що в тих експериментах [5, 6] не вдалося виміряти точний вміст водню з використанням доступних у ті часи методів.

Розвиток теорії і технології виробництва сталі супроводжувався низкою досліджень стосовно розчинності водню і кисню, зумовленої підвищеними вимогами до якості сталі [2], зокрема для залізничного транспорту [7]. Детальніші на той час виміри при різних температурах і, що важливо, при різних відношеннях аргону та водню в газовій фазі H₂O–H₂–Ar, приведені в роботі [8]. Вони визначили формальну константу рівноваги реакції



показавши, що вона не є постійною, а залежить від відношення H₂O/H₂ та Ar/H₂ [8]. Втім, дослідники не приділили достатньої уваги питанню, яким саме чином відношення Ar/H₂ впливає як на рівновагу реакції (1), так і на розчинність водню в залізі.

У паралельному дослідженні [9] автори звернули увагу на вплив відношення Ar/H₂ не тільки на вміст водню, а і на концентрацію кисню, хоча і в умовах обмеженого інтервалу концентрацій. В роботі [10] автори додали більше експериментальних точок в цій системі при підвищених значеннях відношення H₂O/H₂ при Ar/H₂ = 5. Пізніше в роботі [11] визначили ліміт розчинності водню в рідкому залізі при 1600 °C у 25,9 на мільйон (10⁻⁴ % або ppm) або у 0,00142 мольних долі, якщо залізо знаходиться у рівновазі з чистим воднем при 1 атм тиску.

В роботі [12] автори звернули увагу на той факт, що некоректно розглядати термодинаміку тільки реакції (1), ігноруючи розчинність водню в залізі одночасно з киснем, навіть якщо його концентрація невелика. Вони синхронно проаналізували вміст водню і кисню в залізі у рівновазі з

М.М. Gasik — <https://orcid.org/0000-0002-5782-7987>, М.І. Гасик — Scopus Author ID 55832331700

газовою фазою H_2O-H_2 , але без домішок аргону ($Ar/H_2 = 0$). Результати цих та інших експериментальних вимірів показано на рис. 1. Як видно з цих даних, в експериментах [8] концентрація водню в розчині була практично незмінна, незважаючи на варіацію парціального тиску водяного пару. Це погано узгоджується з іншими незалежними даними [9, 10, 12], можливо тому, що в роботі [8] відношення Ar/H_2 не дотримувалось постійним.

Незважаючи на ці роботи, у теорії сталеплавильних процесів [1, 13] довгий час панував дуже спрощений підхід, заснований майже без виключень тільки на реакції (1). В роботі [14] показано, що такий підхід є хибним з точки зору правила фаз, оскільки він ігнорує наявність інших компонентів у системі. Застосування аналогічного підходу до системи $Fe-O-C$ показало, що одночасне врахування CO_2 і CO узгоджується з експериментами набагато краще, ніж тільки CO . Доцільно зауважити, що вже у 1930-х роках було показано про необхідність виміру CO_2 поряд з CO [5, 6], але цей факт не мав подальшого розгляду в аспекті термодинаміки процесу.

Формалізм рівноваги у системі $Fe-O-H-Ar$.

Існуючі результати можна спочатку описати балансом мас. Припустимо, що всі головні компоненти газової фази ідеальні:

$$P_{H_2} + P_{H_2O} + P_{O_2} + P_{Ar} = P^0, \quad (2)$$

де P^0 — загальний тиск (1 атм). Вводячи позначення $A = P_{H_2O}/P_{H_2}$, $B = P_{Ar}/P_{H_2}$, можна записати (2) наступним чином:

$$P_{H_2} (1 + A + B) = P^0 - P_{O_2}. \quad (3)$$

Оскільки при високих температурах рівновага у газовій фазі практично миттєва, парціальний тиск кисню можна визначити через константу реакції дисоціації водяного пару:

$$2H_2O = 2H_2 + O_2; \quad P_{O_2} = A^2 P^0 / K_4, \quad (4)$$

яка була детально оцінена багато разів. При $1600^\circ C$ за даними [1, 12] $\lg K_4 = 8,000 \dots 8,0827$, а за новими $\lg K_4 = 7,97161$ (термодинамічна база даних «FactSage 8.0», 2020). Таким чином, парціальний тиск водню і кисню у будь-якої суміші будуть визначатися:

$$\begin{aligned} P_{H_2} &= P^0 (1 - A^2/K_4)/(1 + A + B); \\ P_{O_2} &= A^2 P^0 / K_4. \end{aligned} \quad (5)$$

Із формули (5) можна зробити цікавий висновок: парціальний тиск кисню не залежить від B (відношення Ar/H_2) на відміну від парціального тиску водню, який залежить як від Ar/H_2 , так і від

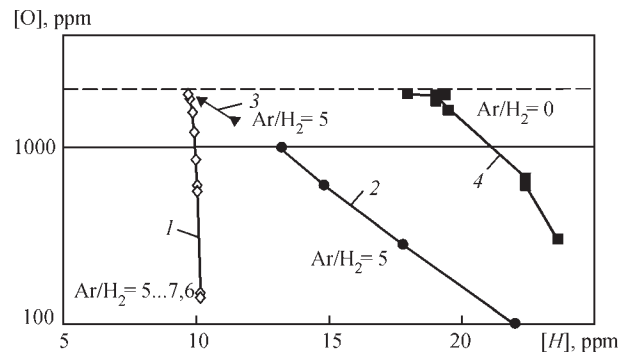


Рис. 1. Експериментальні дані (1 — [8]; 2 — [9]; 3 — [10]; 4 — [12]) про вміст кисню і водню в рідкому залізі при $1600^\circ C$. Горизонтальна лінія показує ліміт розчинності кисню

H_2O/H_2 . Це пояснює розбіжності (рис. 1) в результатах експериментів з використанням аргону.

Водень і кисень у газовій фазі взаємодіють з рідким залізом пропорційно їх концентраціям, утворюючи розчин $Fe-[H]-[O]$. В даному випадку припускаємо, що Ar не розчинюється в рідкому залізі, і тоді вміст водню і кисню в розчині будуть пропорційні активностям цих компонентів у рівновазі з парціальними тисками водню і кисню. Активність (або коефіцієнт активності (γ_i)) компонента є показником ефективності в конкретному розчині щодо його реакцій з іншими компонентами. Класичне визначення активності пов'язує її з парціальним тиском розчиненого компонента в розчині відносно його еталонного стану, як чистої речовини:

$$a_i(X_i) = P_i(X_i) / P_i^0, \quad (6)$$

де P_i — парціальний тиск даного компоненту; P_i^0 — його тиск у еталонному стані ($a_i^0 = 1$). Багато термодинамічних розрахунків за замовчуванням приймають еталонний стан, призначений для чистої речовини. Однак для металургійної системи при $1600^\circ C$ чистий рідкий кисень не є еталонним станом, оскільки він не може існувати в такій формі. Було показано [16, 17], що таким гіпотетичним еталонним станом, які раніше роками використовувались у металургійній практиці, бракує термодинамічного і математичного обґрунтування [14]. У термодинаміці металургійних процесів традиційно використовувався формалізм Вагнера–Люпіса–Елліота з розкладанням коефіцієнта активності в ряд Тейлора [3, 4, 14], коли еталонним станом обирався формальний склад розчину з 1 мас. % компонента (навіть, якщо такого розчину фактично не існувало). Розкладання ряду Тейлора однак є дійсним лише навколо точки, в якій береться похідна по концентрації [17], і не може загалом екстраполюватися в широкий діапазон концентрацій. В роботі [18] показано, що традиційні рівняння Вагнера–Люпіса–Елліота є недійс-

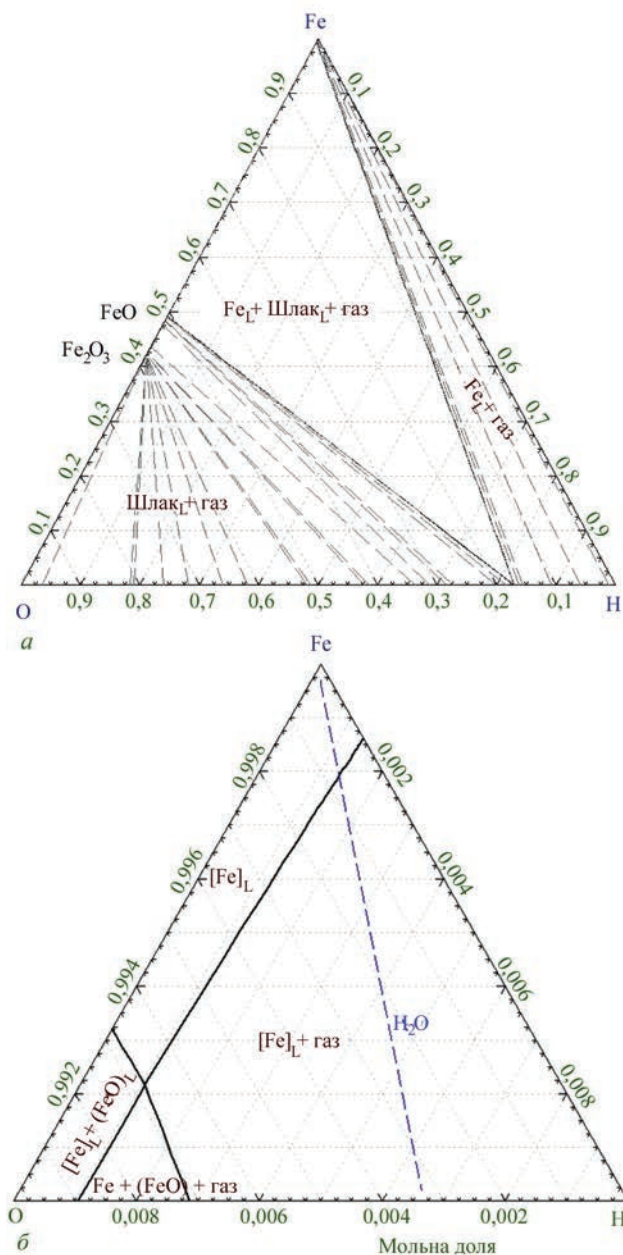


Рис. 2. Діаграма фазової рівноваги в системі Fe–O–H при 1600 °C (а) і кут з боку заліза, як компонента (б), з використанням коректних хімічних потенціалів [17]. Штрихова лінія визначає стехіометрію водяного пару (мольне відношення водню до кисню становить 2)

ними щодо фундаментального рівняння Гіббса–Дюгема [19]. Авторами роботи [17] було показано п'ять головних принципів коректного вибору еталонного стану і розрахунку хімічного потенціалу та доведено, що еталонним станом компонента у розчині є його межа розчинності при даних умовах, оскільки тільки там виконуються всі необхідні термодинамічні і математичні умови.

Таким чином, для водню еталонний стан при 1600 °C є при його максимальному вмісті в залізі (25,9 ppm) при рівновазі з чистим воднем при 1 атм тиску [11], а еталонний стан для кисню (максимальний вміст кисню приблизно 0,20 %) — при

рівновазі з такою газовою сумішшю, в якій парціальний тиск кисню досягає $5,11 \cdot 10^{-9}$ атм (контакт з чистим киснем призвів би до повного перетворення заліза у оксиди). Ці максимальні концентрації відповідають активностям, рівним 1 для водню і кисню, оскільки:

функція енергії Гіббса є безперервною та диференційованою за кількістю добавленої речовини у фазу розчину, коли цей розчин існує (не є гіпотетичним);

активності компонентів є реальними, вимірюваними та безперервними монотонними зростаючими функціями у фазі розчину (стан насичення досягається у межах належного діапазону концентрацій);

у насиченому стані похідні від активності компонента по температурі і по тиску дорівнюють нулю.

Правильні визначення активностей і вільної енергії дають можливість розрахувати детальну рівновагу в системі Fe–O–H.

Чисельний термодинамічний розрахунок в системі Fe–O–H. Термодинамічний розрахунок було проведено з використанням програми і баз даних «FactSage 8.0». Спочатку була розрахована формальна діаграма фазової рівноваги в цій системі при 1600 °C у мольних долях (рис. 2). Видно, що з боку заліза існує дві фазові області: метал–газ або метал–газ–шлак (рідкі оксиди заліза). Якщо вміст кисню невеликий, а водню практично немає, то третя можлива фаза (залізо–шлак) може бути в рівновазі із залізом без явної газової фази (рис. 2, б). Така ж діаграма була розрахована у масових процентах (рис. 3). Видно, що лінія рівноваги між шлаком (FeO) і рідким залізом майже горизонтальна, що показує на практичну незмінність межі розчинності кисню, незважаючи на підвищення вмісту водню до концентрації приблизно 0,0019 % [H]. Подальше збільшення водню в системі веде до різкого падіння вмісту кисню в залізі.

Наступний розрахунок було зроблено для випадку доданого аргону при $Ar/H_2 \approx 0,1 \dots 0,2$ та $5,0 \dots 6,0$ при інших постійних умовах (рис. 4). Оскільки концентрація аргону мало впливає на вміст кисню, була оцінена залежність вмісту водню від Ar/H_2 при різних H_2O/H_2 (рис. 5).

Цей вміст водню може бути апроксимовано регресійним рівнянням на рис. 5, яке прогнозує концентрацію водню тим точніше, чим вище відношення $B = Ar/H_2$. Це є логічним, оскільки при малому вмісті аргону ($B \rightarrow 0$) кількість водню в розчині буде сильно залежати від $A = H_2O/H_2$ (за виразом (5)). При підвищенні B , особливо за умови $B > A$, вміст водню буде здебільшого визначатися саме відношенням Ar/H_2 (доцільно зазначити, що при 1600 °C максимальні значення $A < 0,5 \dots 0,75$,

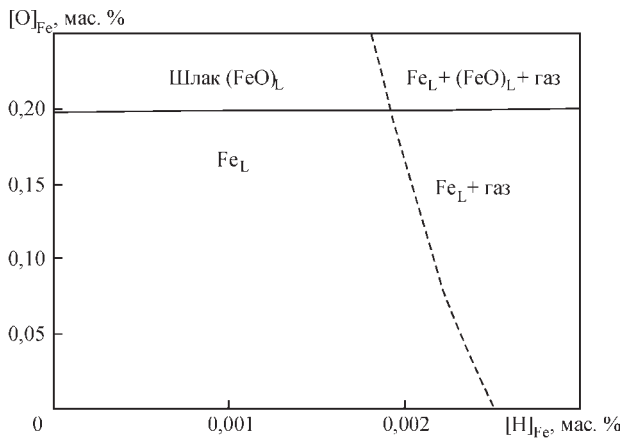


Рис. 3. Діаграма фазової рівноваги в системі Fe–O–H при 1600 °С. Показано області стабільності різних фаз

коли ще не відбувається утворення оксидів заліза, тобто шлаку). В попередніх експериментах (див. рис. 1) з використанням аргону значення $B = 5,0 \dots 7,6$, що пояснює значні відмінності у вимірних концентраціях водню при аналогічних значеннях H_2O/H_2 .

Наступним питанням було визначення коефіцієнтів активності водню і кисню у розчині. Прямий підхід використовує відношення активності компонента до його концентрації у мольних долях і не вимагає якісь штучні моделі розчинів [12, 14, 16, 17]. Згідно із рівнянням (6), в еталонному стані ($a_i = 1$) коефіцієнт активності будь-якого компонента (γ_i^0) буде дорівнювати його оберненої насиченої концентрації (X_i^0):

$$\gamma_i^0 = 1/X_i^0 \quad (7)$$

Коефіцієнти активності водню і кисню змінюються залежно від відношень Ar/H_2 та H_2O/H_2 у вузьких границях, але нелінійно (рис. 6). Перше

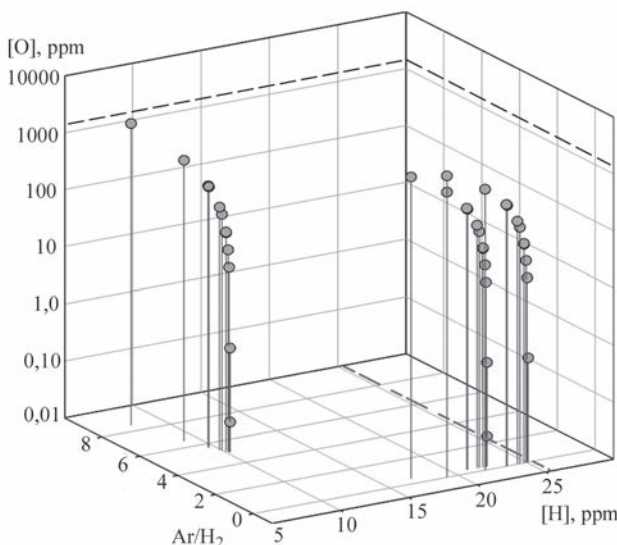


Рис. 4. Вміст кисню і водню в системі Fe–O–H–Ar при 1600 °С для різних відношень Ar/H_2 . Штрихові лінії показують межі розчинності водню і кисню

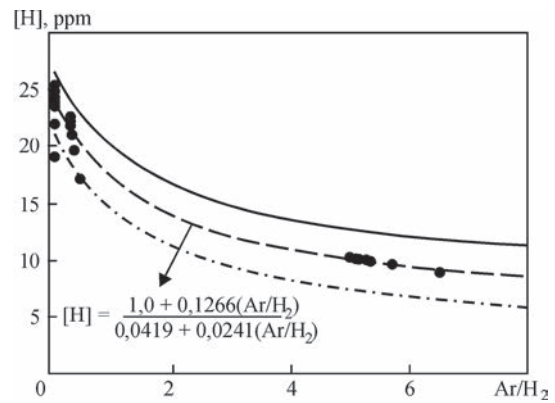


Рис. 5. Вміст водню в системі Fe–O–H–Ar при 1600 °С (рис. 4) для різних відношень Ar/H_2 . Штрихові лінії показують довірчий інтервал для регресійного рівняння

відношення впливає сильніше на коефіцієнт активності кисню і набагато менше на коефіцієнт активності водню. Друге має зворотній ефект: більше впливає на коефіцієнт активності водню, а не кисню, як можна було б передбачити. З регресійних рівнянь на рис. 6 можна побачити, що

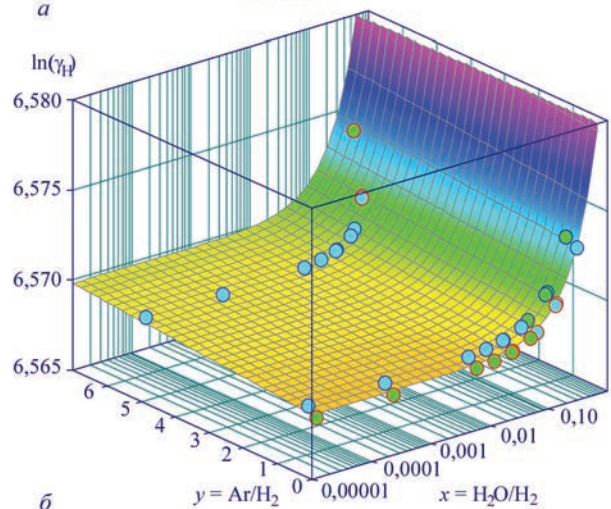
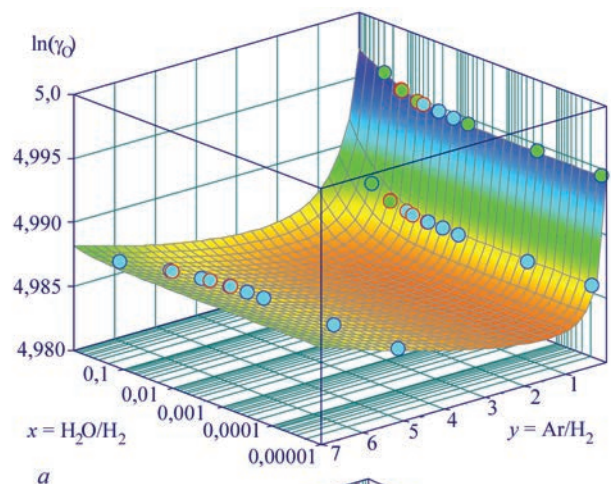


Рис. 6. Натуральні логарифми коефіцієнтів активності кисню $\ln(\gamma_O) = (a + bx + cy + dy^2)/(1 + ex + fy + gy^2)$: $a = 4,9944208$; $b = 11,13995$; $c = 32,451068$; $d = -0,88011301$; $e = 2,2286863$; $f = 6,515328$; $g = -0,17770942$ (а) і водню $\ln(\gamma_H) = a + bx + cy$: $a = 6,5685561$; $b = 0,016389753$; $c = 0,00018215654$ (б) в рідкому залізі від відношень Ar/H_2 та H_2O/H_2 при 1600 °С

вплив відношень $y = \text{Ar}/\text{H}_2$ та $x = \text{H}_2\text{O}/\text{H}_2$ на коефіцієнт активності водню незалежний від іншого, тобто не має взаємної кореляції між впливом цих відношень (рис. 6, б). Для кисню, навпаки, є спільний вплив цих відношень на коефіцієнт активності (рис. 6, а). Апроксимуючи поверхні і рівняння побудовано нелінійною регресією по точках, розрахованих у цій роботі.

Таким чином, можна зазначити, що вміст водню в рідкому залізі, який регулюється одночасно відношеннями Ar/H_2 та $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2$, впливає на коефіцієнт активності кисню і його концентрацію сильніше, ніж вважалось. Аналогічний вплив на коефіцієнт активності водню менший і більш залежний від $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2$, як і концентрація водню при малих значеннях Ar/H_2 .

Висновки

1. Проведено аналіз відомих експериментальних даних по взаємодії в системі $\text{Fe}-\text{O}-\text{H}-\text{Ar}$ і термодинамічні розрахунки діаграми фазової рівноваги з використанням нових даних з урахуванням правильного визначення та розрахунку активності компонентів.

2. Показано, що парціальний тиск кисню в газовій фазі не залежить від відношення Ar/H_2 на відміну від парціального тиску водню, який залежить як від Ar/H_2 , так і від $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2$. Це пояснює наявні розбіжності в результатах історичних експериментів з використанням аргону.

3. Вміст водню в рідкому залізі може бути апроксимовано регресійним рівнянням, яке прогнозує концентрацію водню тим точніше, чим вище відношення Ar/H_2 . При малому вмісті аргону кількість водню в розчині буде сильно залежати від $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2$, а у протилежному випадку вміст водню буде здебільшого визначатися саме відношенням Ar/H_2 .

4. Коефіцієнти активності водню і кисню змінюються залежно від відношень Ar/H_2 і $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2$ у вузьких границях, але нелінійно. Перше відношення впливає сильніше на коефіцієнт активності кисню і набагато менше — водню. Друге має зворотній ефект: більше впливає на коефіцієнт активності водню, а не кисню, як можна було б передбачити.

5. Результати досліджень мають практичне значення для контролю вмісту водню і кисню при обробці сталі газовими сумішами на базі аргону при наявності водяного пару. Підхід може бути розширено на леговані сталі і стопи різного складу.

Список літератури

1. Филиппов С.И. (1967) *Теория металлургических процессов*. Москва, Металлургия.
2. Величко А.Г. (2005) *Внепечная обработка стали*. Днепропетровск, Системные технологии.

3. Охотский В.Б., Костыолов О.Л., Симонов В.К. (1997). *Теория металлургических процессов*. Київ, ИЗМН.
4. Кньюппель Г. (1973) *Раскисление и вакуумная обработка стали*. Москва, Металлургия.
5. Vacher H.C. (1933) The system liquid iron–carbon oxides. *US Bureau of Standards J. Res.*, **11**, 541–551.
6. Vacher H.C., Hamilton E.H. (1931) Carbon–oxygen equilibrium in liquid iron. *Transact. AIME*, **95**, 124–140.
7. Козловский А.И., Медовар Б.И., Прождак Ю.С. и др. (1999) Применение методов специальной электрометаллургии и внепечной обработки при производстве колесной стали. *Пробл. спец. электрометаллургии*, **2**, 31–38.
8. Sakao H., Sano K. (1960) Equilibrium between dissolved oxygen in liquid iron and $\text{H}_2-\text{H}_2\text{O}$ gas mixtures. *Transact. JIM*, **1**, 38–42.
9. Schenck H., Wunsch H. (1961) Über die Gleichgewichtslöslichkeit des Wasserstoffs im flüssigen reinen Nickel und Eisen und die Beeinflussung im Eisen durch Sauerstoff. *Arch. Eisenhüttenw.*, **32**(11), 779–790.
10. Гасик М.И., Хитрик С.И. (1965) Взаимодействие жидкого железа с пароводородной смесью. *Металлургия и коксохимия*, **3**, 5–16.
11. Ban-ya S., Fuwa T., Ono K. (1967) Solubility of hydrogen in liquid iron alloys. *Tetsu-to-Hagane*, **53**, 13–28.
12. Kubaschewski O., Alcock C.B. (1979) *Metallurgical thermochemistry*. 5th Ed. Pergamon Press, Oxford.
13. Sanbongi K. (1981) Thermodynamics of ironmaking and steelmaking processes. *Transact. JIM*, **22**, 663–676.
14. Lupis C.H.P. (1983) *Chemical thermodynamics of materials*. North-Holland, NY.
15. Гасик М.М., Гасик М.И. (1985) Термодинамическое исследование равновесия углерод–кислород в жидком железе. *Изв. АН СССР. Металлы*, **3**, 22–30.
16. Gasik M. (2013) *Handbook of Ferroalloys: Theory and Technology*, Elsevier. Butterworth-Heinemann, Oxford, UK.
17. Гасик М.М., Гасик М.И. (2020) Хімічні потенціали і активності у металургійних процесах. *Сучасна електрометалургія*, **4**, 39–43.
18. Hillert M. (1998) *Phase equilibria, phase diagrams and phase transformations: their thermodynamic basis*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK.
19. Schuhman R.Jr. (1955) Application of Gibbs–Duhem equations to ternary systems. *Acta Metall.*, **3**, 219–226.

References

1. Filippov, S.I. (1967) *Theory of metallurgical processes*. Moscow, Metallurgiya [in Russian].
2. Velichko, A.G. (2005) *Out-of-furnace steel treatment*. Dnepropetrovsk, Sistemnye Tekhnologii [in Russian].
3. Okhotsky, V.B., Kostyolov, O.L., Simonov, V.K. (1997) *Theory of metallurgical processes*. Kyiv, IZMN [in Ukrainian].
4. Knyuppel, G. (1973) *Deoxidation and vacuum treatment of steel*. Moscow, Metallurgiya [in Russian].
5. Vacher, H.C. (1933) The system liquid iron–carbon oxides. *US Bureau of Standards J. Res.*, **11**, 541–551.
6. Vacher, H.C., Hamilton, E.H. (1931) Carbon–oxygen equilibrium in liquid iron. *Transact. AIME*, **95**, 124–140.
7. Kozlovsky, A.I., Medovar, B.I., Projdak, Yu.S. et al. (1999) Application of methods of special electrometallurgy and out-of-furnace treatment in production of wheel steel. *Problemy Spets. Elektrometallurgii*, **2**, 31–38 [in Russian].
8. Sakao, H., Sano, K. (1960) Equilibrium between dissolved oxygen in liquid iron and $\text{H}_2-\text{H}_2\text{O}$ gas mixtures. *Transact. JIM*, **1**, 38–42.

9. Schenck, H., Wunsch, H. (1961) Über die Gleichgewichtslöslichkeit des Wasserstoffs im flüssigen reinen Nickel und Eisen und die Beeinflussung im Eisen durch Sauerstoff. *Arch. Eisenhüttenw.*, **32(11)**, 779–790.
10. Gasik, M.I., Khitrik, S.I. (1965) Interaction of liquid iron with vapor-hydrogen mixture. *Metallurgiya i Koksokhimiya*, **3**, 5–16 [in Russian].
11. Ban-ya, S., Fuwa, T., Ono, K. (1967) Solubility of hydrogen in liquid iron alloys. *Tetsu-to-Hagane*, **53**, 13–28.
12. Kubaschewski, O., Alcock, C.B. (1979) *Metallurgical thermochemistry*. 5th Ed. Pergamon Press, Oxford.
13. Sanbongi, K. (1981) Thermodynamics of ironmaking and steelmaking processes. *Transact. JIM*, **22**, 663–676.
14. Lupis, C.H.P. (1983) *Chemical thermodynamics of materials*. North-Holland, NY.
15. Gasik, M.M., Gasik, M.I. (1985) Thermodynamic investigation of hydrogen-oxygen equilibrium in liquid iron. *Izv. AN SSSR. Metall.*, **3**, 22–30 [in Russian].
16. Gasik, M. (2013) *Handbook of Ferroalloys: Theory and Technology*, Elsevier. Butterworth-Heinemann, Oxford, UK.
17. Gasik, M.M., Gasik, M.I. (2020) Chemical potentials and activities in metallurgical processes. *Suchasna Elektrometallurhiya*, **4**, 39–43 [in Ukrainian].
18. Hillert, M. (1998) *Phase equilibria, phase diagrams and phase transformations: Their thermodynamic basis*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK.
19. Schuhman, R.Jr. (1955) Application of Gibbs–Duhem equations to ternary systems. *Acta Metall.*, **3**, 219–226.

CHEMICAL EQUILIBRIUM IN Fe–O–H SYSTEM AT HIGH TEMPERATURES

M.M. Gasik^{1,2}, M.I. Gasik²

¹Aalto University. 00076, Aalto, Espoo, Finland. E-mail: michael.gasik@aalto.fi

²National Metallurgical Academy of Ukraine. 4 Gagarin Prosp., 49000, Dnipro, Ukraine

The issue of thermodynamic equilibrium in Fe–O–H system at the temperatures of steel-melting processes (1600 °C) was considered. The historical data array, features of experiments on obtaining them and their drawbacks were analyzed. A new more correct calculation of hydrogen and oxygen concentration in liquid iron and in the gas phase was performed. New coefficients of activity were calculated, proceeding from precise thermodynamic principles, unlike the earlier used artificial models based on interaction parameters. Ref. 19, Fig. 6.

Key words: thermodynamics; iron; hydrogen; oxygen; solutions; activity; equilibrium

Надійшла до редакції 26.04.2021



Інститут електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

Міжнародна Асоціація «Зварювання»

Десята міжнародна конференція

ПРОМЕНЕВІ ТЕХНОЛОГІЇ В ЗВАРЮВАННІ та ОБРОБЦІ МАТЕРІАЛІВ

6 – 11 вересня 2021 р.

Україна, Одеса

Голова програмного комітету
академік І.В. Кривцун

Тематика конференції

- Лазерне та електронно-променеве зварювання, різання, наплавлення, термообробка, нанесення покриттів
- Електронно-променева плавка та рафінування
- Гібридні процеси
- 3D технології
- Моделювання променевих технологій. Неруйнівний контроль.
- Матеріалознавчі проблеми лазерних та електронно-променевих технологій

ОБЛАДНАННЯ ♦ ТЕХНОЛОГІЇ ♦ МОДЕЛЮВАННЯ



АДРЕСА ОРГКОМІТЕТУ
Україна, 03150, м. Київ, вул. Казимира Малевича, 11
Інститут електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України
Тел./факс: (38044) 200-82-77
E-mail: journal@paton.kiev.ua
<http://pwj-scientists.com/rus/ltwmp2021>

