

ПРОГНОЗУВАННЯ ПЛАВКОСТІ СПЕЦІАЛЬНИХ СТАЛЕЙ НА ОСНОВІ КОНЦЕПЦІЇ СПРЯМОВАНОГО ХІМІЧНОГО ЗВ'ЯЗКУ

Тогобицька Д.М.¹ [ORCID], Поворотня І.Р.² [ORCID], Кукса О.В.³ [ORCID],
Ходотова Н.Є.⁴ [ORCID]

¹Інститут чорної металургії ім. З. І. Некрасова НАН, д.т.н., проф., України,

²Інститут чорної металургії ім. З. І. Некрасова НАН, н.с., к.т.н., України,

³Інститут чорної металургії ім. З. І. Некрасова НАН, н.с., к.т.н., України,

⁴Інститут чорної металургії ім. З. І. Некрасова НАН, м.н.с., України,

Анотація. *Нагальним питанням сьогодення є генерація та розробка інноваційних технологічних рішень направлених на підвищення якості металопродукції, розширення експлуатаційних можливостей сталей та сплавів спеціального призначення, що супроводжується раціональним використанням енергетичних, сировинних запасів та задовільняють невпинно зростаючі потреби споживачів. Внутрішньодержавним питанням є утримання належного рівня вітчизняної металургійної галузі, як запоруки розвитку та стабілізації економіки у мінливих умовах. У зв'язку з цим в роботі розглянуто нержавіючі сталі (вміст Cr до 26%, Ni до 20%), як найбільш затребувані на металургійному ринку. Підґрунтям для проведення моделювання обрана оригінальна концепція спрямованого хімічного зв'язку, ядром якої є розгляд металевих розплавів, як хімічно єдиних систем. Розроблено адекватну математичну модель для прогнозування температури ліквідус хромо-нікелевих сталей на основі інтегральних параметрів міжатомної взаємодії ($R^2 \geq 0,95$). Результати досліджень рекомендуються до використання в науково – дослідних та промислових умовах з метою спрямованого формування складу та властивостей продуктів плавки, а також зниження енергетичних витрат за допомогою інтеграції розроблених моделей в АСНД сталеплавильного виробництва.*

Ключові слова: *нержавіючі сталі, спеціальні сталі, параметри міжатомної взаємодії, якість металу, прогнозування, моделі*

Нержавіючі сталі є стратегічними матеріалами сучасної індустрії, завдяки унікальному поєднанню фізико-хімічних, механічних та корозійних властивостей, які визначають їх широке використання у хімічній, харчовій, енергетичній та машинобудівній промисловості. Світове споживання нержавіючої сталі постійно зростає, а серед країн лідерів виробництва якісного

металу Китай, Японія, США все напруженіша конкуренція та боротьба за першість. Україна історично має потужну базу виробництва спеціальних сталей на провідних підприємствах країни, зокрема ПрАТ «Дніпроспецсталь», ПАТ «Запоріжсталь», ТОВ «Інтерпайп Україна». Значний потенціал розвитку виробництва нержавіючих сталей пов'язаний у першу чергу з можливістю модернізації наявних електросталеплавильних печей, впровадженню нових технологічних схем виробництва, що забезпечить контролювання складу сталі та зменшення шкідливих домішок, підвищення якості металу, а отже і конкурентоздатності.

Наразі незважаючи на існуючий потенціал, виробництво нержавіючих сталей в Україні зіштовхується з жорсткими викликами сучасності [1, 2]. Ключовою проблемою для повноцінної роботи металургійного сектору є війна, яка призвела до часткової втрати промислових підприємств, частина працює під обстрілами, які призводять до пошкоджень цехів, а іноді і тимчасової зупинки підприємств. Виробництво нержавіючих сталей є дуже енергоємним процесом, а постійні пошкодження енергетичної інфраструктури України створюють відчутний дефіцит електроенергії, що критично відображається на роботі електродугових печей та підвищенні собівартості металу. Україна не має значних власних родовищ легуючих елементів для виробництва нержавіючих сталей, зокрема йдеться про нікель, молібден, хром, тому вони імпортуються, таким чином формується сировинна залежність. До перешкод також слід віднести і кадрову нестачу кваліфікованих металургів виробничників, у зв'язку з значною міграцією населення та процесами мобілізації. Особливо відчутним для української металургійної промисловості є новий критерій щодо імпорту сталі у країни ЄС, який стосується рівня викидів CO₂, що є ознакою необхідності значних інвестицій у «зелену металургію», які є мабуть не зовсім на часі.

З огляду на ці обставини одним із шляхів по адаптуванню металургійної промисловості щодо заявлених перешкод слід розглянути спосіб ефективного використання легуючих добавок за рахунок точного прогнозування властивостей через призму моделей для сталей і добавок (температури

плавлення та кристалізації, щільності, теплопровідності та інших) на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку, що сприятиме зниженню як енергетичних, так і витрат самої добавки на виробництво завдяки науково вірно обґрунтованому її підбору. Розробка моделей здійснюється на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку [3]. Головна ідеологія, що робить її унікальним інформаційно-алгоритмічним апаратом оформленим у програмні комплекси «Metal» та «Slag», полягає у розгляді металургійних розплавів, як хімічно єдиних систем, а не просто механічної суміші складових та вираженню їх зв'язків в інтегральних параметрах міжатомної взаємодії: Z^y – параметр зарядового стану системи, e ; d – середньостатистична між'ядерна відстань, 10^{-1}нм ; $tg\alpha$ – константа для кожного елемента, яка характеризує градієнт зміни радіусу іона при зміні його заряду; ρ_1 – спрямована зарядова щільність, $e/\text{нм}$.

Аналіз взаємозв'язків параметрів міжатомної взаємодії з температурою плавлення нержавіючих сталей за даними роботи [4] дозволили встановити найбільш інформативні (рис.1). Температура плавлення суттєво залежить від співвідношення елементів хрому та нікелю, що відображено параметром міжатомної взаємодії – $tg\alpha$. На рис.1 сформувались три області, в залежності від числових значень співвідношення Cr/Ni відбувається відхилення від тренду 1, при його збільшенні до тренду 2 та зменшенні температури плавлення, а при зменшенні співвідношення до тренду 3 та зростанню температурних показників, що може ймовірно бути використано, як спосіб класифікації сталей по хромо-нікелевій частці. На основі результатів проведеного кореляційно – регресійного аналізу для прогнозування властивостей досліджуваної вибірки даних розроблена модель: $T_{\text{лікв}} = 10^3 \times (3,317 - 0,209Z^y - 17,458tg\alpha)$, з достатньою точністю прогнозу ($R^2=0,95$) для інтеграції у АСУТП сталеплавильного виробництва.

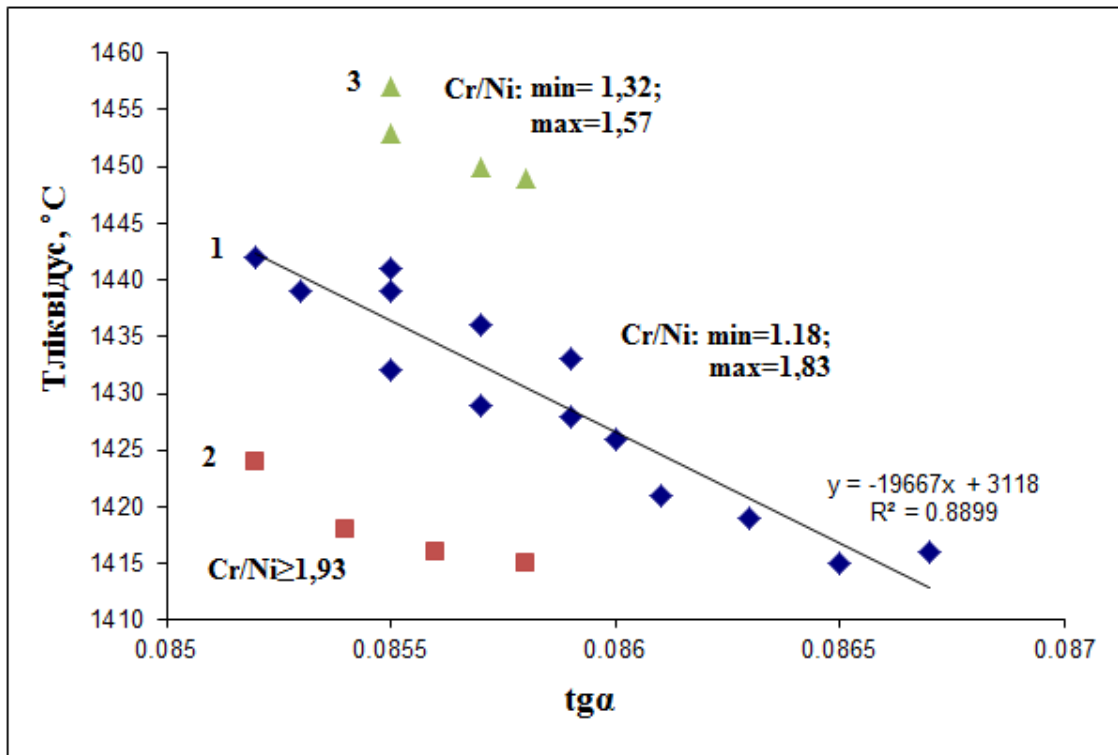


Рисунок 1 - Залежність температури ліквідус від параметру міжатомної взаємодії (tga)

Розроблена модель входить у склад створеного комплексу базових моделей для прогнозування першочергових фізико-хімічних і теплофізичних властивостей металевих розплавів з метою створення засад для ефективного використання добавок і одержання високоякісного металу, що відповідає міжнародним вимогам та є конкурентоздатним не лише на українському металургійному ринку, а також на закордонному.

Висновок. Температурний режим плавки та розливання спеціальних сталей та сплавів впливає на ефективність протікання реакцій між металом та шлаком, ступінь засвоєння легуючих або модифікуючих добавок, утворення неметалевих включень та газів, механічні та фізико-хімічні властивості металу. Знання та оперативні методи визначення температури ліквідус, що враховують хімічний склад сталі та міжатомну взаємодію між компонентами розплаву, дають можливість уникнути перегріву металу, підвищити його якість та дати рекомендації щодо оптимального температурного режиму плавки, що особливо цінно в сучасних реаліях металургійної промисловості.

ЛІТЕРАТУРА

1. Забашта Є.Ю., Демченко К.В. «Розвиток металургійного комплексу в Україні: кризова адаптація та стратегія «зеленої» відбудови». Економіка та суспільство, вип. 80, 2025. <https://economyandsociety.in.ua/index.php/journal/article/view/6843>.
2. Gryshchenko S.G., Proidak Yu.S., Ponomarenko R.V., Kravchenko A.P., Kalenkov O.F., Kudriavtsev S.L. (2025). Ukrainian steel and ferroalloys in 2022-2024: how russian aggression has impacted on the work of the country's metallurgical industry. Theory and Practice of Metallurgy, (1), 31–35. <https://doi.org/10.15802/tpm.1.2025.04>
3. Togobitska D. and Belkova A. New approach to evaluating the thermodynamic consistency of melts in the «Metal-Slag» system based on interatomic interaction parameters // Lithuanian Journal of Physics. Vol.64, No.1, pp.58-71 (2024). <https://doi.org/10.3952/physics.2024.64.1.6>
4. G. ALLAN «Castability, solidification mode and residual ferrite distribution in highly alloyed stainless steels», ECSC research project, EUR13941, European Communities, Luxembourg 1997.

PREDICTION OF THE FUSIBILITY OF SPECIAL STEELS BASED ON THE CONCEPT OF DIRECTED CHEMICAL BONDING

Daria Togobitska, Iryna Povorotnia, Volodymyr Kuksa, Nadiya Khodotova

Abstract. *The urgent issue of today is the generation and development of innovative technological solutions aimed at improving the quality of metal products, expanding the operational capabilities of special-purpose steels and alloys, which is accompanied by the rational use of energy and raw material reserves. In this regard, the work considers stainless steels, as the most demanded in the metallurgical market. The basis for modeling was chosen original concept of directed chemical bonding. An adequate mathematical model for predicting the liquidus temperature of chromium-nickel steels based on the integral parameters of interatomic interaction was developed ($R^2 \geq 0.95$). The results of the research are recommended for use in scientific research and industrial conditions for the purpose of directed formation of the composition and properties of smelting products, as well as reducing energy costs by integrating the developed models into Automated systems of scientific research of steelmaking.*

Keywords: *stainless steels, special steels, interatomic interaction parameters, metal quality, prediction, models*

REFERENCE

1. Zabashta E.Yu., Demchenko K.V. «Development of the metallurgical complex in Ukraine: crisis adaptation and strategy of «green» reconstruction». Economy and Society, issue 80, 2025. <https://economyandsociety.in.ua/index.php/journal/article/view/6843>. [in Ukrainian].
2. Gryshchenko S.G., Proidak Yu.S., Ponomarenko R.V., Kravchenko A.P., Kalenkov O.F., Kudriavtsev S.L. (2025). Ukrainian steel and ferroalloys in 2022-2024: how russian

aggression has impacted on the work of the country's metallurgical industry. Theory and Practice of Metallurgy, (1), 31–35. <https://doi.org/10.15802/tpm.1.2025.04>

3. Togobitska D. and Belkova A. New approach to evaluating the thermodynamic consistency of melts in the «Metal-Slag» system based on interatomic interaction parameters //Lithuanian Journal of Physics. Vol.64, No.1, pp.58-71 (2024). <https://doi.org/10.3952/physics.2024.64.1.6>

4. G. ALLAN «Castability, solidification mode and residual ferrite distribution in highly alloyed stainless steels», ECSC research project, EUR13941, European Communities, Luxembourg 1997.