

Л.Г.Тубольцев, Н.И.Падун, В.А.Горохова

КЛАСТЕРНАЯ МОДЕЛЬ И ПОВЕДЕНИЕ КИСЛОРОДА В ЖЕЛЕЗОУГЛЕРОДИСТОМ РАСПЛАВЕ

Рассмотрена возможность использования кластерной модели железоуглеродистого расплава для объяснения механизма поведения кислорода и азота в процессе кислородно-конвертерной плавки. Показано, что с повышением температуры расплава размеры твердых кластеров уменьшается, а их суммарная площадь поверхностей увеличивается. При этом возникает возможность на большей поверхности кластеров удерживаться большему количеству кислорода и азота, что в конечном итоге приводит к возрастанию их концентрации по мере повышения температуры.

Ключевые слова: железоуглеродистый расплав, кластерная модель, размер кластера, кислород

Состояние вопроса. При производстве низко- и ультранизкоуглеродистых марок стали важно уменьшить содержание углерода в расплаве во время продувки до такого уровня, чтобы на выпуске его содержание находилось в пределах, требуемых для данной марки стали, или чтобы при последующем вакуумировании в RH-агрегате с помощью растворенного в стали кислорода можно было провести обезуглероживание до минимальных значений. В соответствии с этими требованиями содержание углерода в расплаве в конце продувки ЕОВ (End of Blow) в среднем снижается до уровня 0,04 %. При этом повышенное содержание кислорода и азота в расплаве оказывает негативное влияние на качество стали [1].

Соотношение углерода и кислорода (азота) в расплаве является важной характеристикой кислородно-конвертерной плавки и может являться показателем, характеризующим эффективность технологии [2]. В качестве примера приведем результаты проведенных авторами лабораторных исследований на 1,5-тонном конвертере различных вариантов технологии с верхней продувкой (рис. 1). Представленные данные характеризуют тенденцию поведения кислорода при разных значениях углерода. Аналогичным образом ведет себя и азот в железоуглеродистом расплаве.

Для оценки эффективности работы кислородного конвертера по достижении оптимального соотношения углерода и содержания газов можно использовать такие, обычно применяемые типичные показатели, как производство содержания углерода на содержание кислорода (азота) в расплаве $[C]*[O]$ [3]. Однако проведенный нами анализ показал, что показатель $[C]*[O]$ можно использовать для весьма узкого диапазона изменения углерода, поскольку на него оказывает значительное влияние абсолютное значение содержания углерода в расплаве и температура расплава.

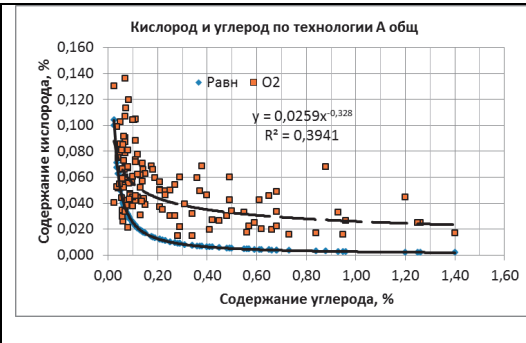


Рисунок 1 – Зависимость содержания кислорода от содержания углерода в расплаве для 1,5-т конвертера с верхней продувкой

Если фактические данные зависимости содержания кислорода от содержания углерода в расплаве представить в виде зависимости произведения $[C]*[O]$ от содержания углерода $[C]$, мы получим иную зависимость, которая с высокой степенью достоверности описывается прямой линией (рис.2). Здесь тенденция наличия прямой зависимости между произведением $[C]*[O]$ и содержанием углерода в расплаве прослеживается достаточно четко. Отметим, что такая же прямая зависимость наблюдается при рассмотрении каждого конкретного варианта кислородно-конвертерной плавки.

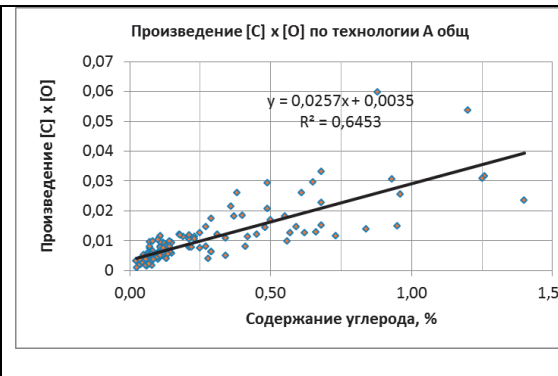


Рисунок 2 – Зависимость произведения содержания углерода и кислорода от содержания углерода в расплаве для 1,5-т конвертера с верхней продувкой

Изложение основных результатов исследования

Наличие четко выраженной прямой зависимости показывает, что мы имеем дело с линейным параметром, который представляет собой линейный размер некоторого объема «твердого тела», деленного на его «поверхность». В этом случае произведение $[C]*[O]$ характеризует содержание кислорода на поверхности «твердого тела», а содержание углерода $[C]$ определяет объем этого тела.

Чтобы определить размеры вышеупомянутого «твердого тела» воспользуемся кластерной моделью расплава, которая определяет расплав в

виде чередующихся в его пространстве кластеров (структурно упорядоченные микрообласти, которые по своему строению напоминают кристалл) и разупорядоченных зон (рис.3). [4]

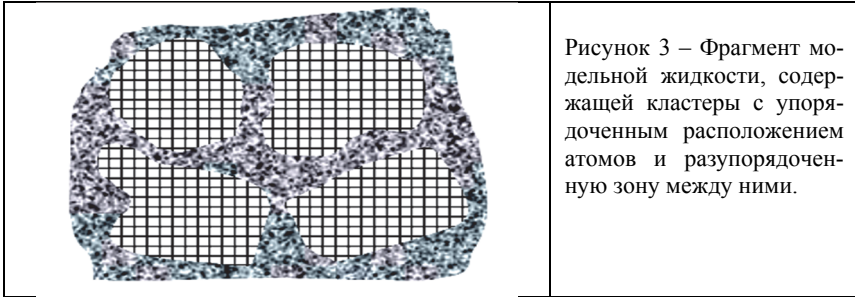


Рисунок 3 – Фрагмент модельной жидкости, содержащей кластеры с упорядоченным расположением атомов и разупорядоченную зону между ними.

В настоящее время интенсивно развиваются экспериментальные и теоретические методы изучения тонкой структуры жидких металлов. В связи с этим оказывается актуальной задача разработки специальных способов оценки количественных характеристик и параметров, описывающих структурную микронеоднородность жидкостей. В соответствии с одним из основных следствий об аддитивности распределения свойств жидкости Φ_S по ее структурным составляющим для квазиполикристаллической модели можно записать;

$$\Phi_S = \Phi_{\text{кл}} + \Phi_{\text{раз}} \quad (1)$$

где $\Phi_{\text{кл}}$, $\Phi_{\text{раз}}$ – относительные доли кластеров и разупорядоченной зоны соответственно.

Воспользуемся результатами проведенных нами металлографических исследований мгновенно замороженных частиц железоуглеродистого расплава [5], которые подтверждают принципиальную возможность использования гипотезы о кластерном характере расплава. На рис.4. показаны кластеры расплава, полученные путем заморозки жидкости. На рис.4,б для иллюстрации нанесены предполагаемые структурно упорядоченные микрообласти кристаллического состава расплава.

В пользу возможности использования гипотезы о ячеечном строении расплава металла и его схожести с твердыми телами при небольшой температуре перегрева над ликвидусом, что характерно для кислородно-конвертерной плавки, свидетельствуют следующие факторы:

незначительное изменение объема металла при плавлении;

скрытая теплота плавления металла и изменение энтропии при этом гораздо меньше скрытой теплоты и энтропии испарения;

характер теплового движения в жидкости вблизи температуры плавления такой же, как и в твердом теле, о чем свидетельствуют практически одинаковые теплоемкости металлов в жидком и твердом состоянии;

вблизи точки плавления жидкие металлы обладают упругостью на сдвиг, так же как и твердые;

по данным рентгеноструктурного анализа расположение частиц в расплавах металлов не беспорядочное, а характерное для кристаллических тел.

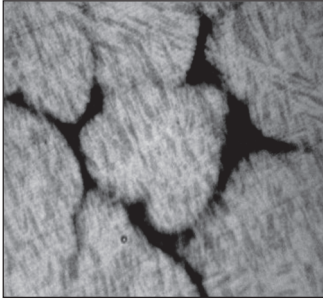


Рисунок 4, а – Виды блоков из δ -частиц в структуре жидкости массой 40 г до их коагуляции в процессе заковки стали от 1640–1650 $^{\circ}$ C. б – для стали с 0,17%С; 0,25%Mn, 0,75%Si, 0,037%P, 0,014%S. Травлено пикратом натрия.

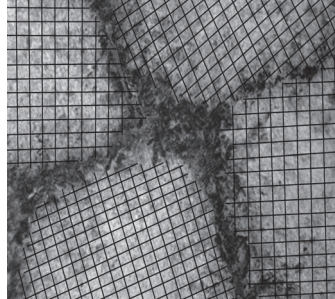


Рисунок 4,б – Виды блоков из δ -частиц в структуре жидкости массой 40 г до их коагуляции в процессе заковки стали от 1640–1650 $^{\circ}$ C. а – для стали с 0,8%С, 0,5%Mn, 0,55%Si, 0,042%P, 0,012%S. Травлено пикратом натрия.

На формирование структуры готового металла и содержание газов в стали оказывают влияние условия его выплавки в кислородном конвертере, для которых характерно наличие большого количества газов как в полости конвертера при продувке кислородом, так и внутри ванны металла и шлака вследствие интенсивного барботажа расплава. Основными газами, содержащимися в жидком железоуглеродистом расплаве, являются кислород, азот и водород. Общепринято [6], что кислород в жидкой стали находится в виде раствора и в виде оксидных неметаллических включений, азот – в виде раствора и в виде нитридов. Водород не вступает в реакцию с элементами жидкой стали и поэтому его можно не учитывать при рассмотрении кластерной модели расплава.

В жидком железоуглеродистом расплаве возможно существование кислорода в активной, т.е. несвязанной форме, а также в виде оксидных включений. При рассмотрении равновесного содержания кислорода в расплаве можно отметить, что, несмотря на восстановительную способность углерода, часть кислорода все же располагается на границах кластера в виде оксида [FeO], который не отрывается от поверхности кластера и не переходит в шлак. Поэтому можно принять, что экспериментальное определение равновесного содержания кислорода характеризует его растворимость в расплаве.

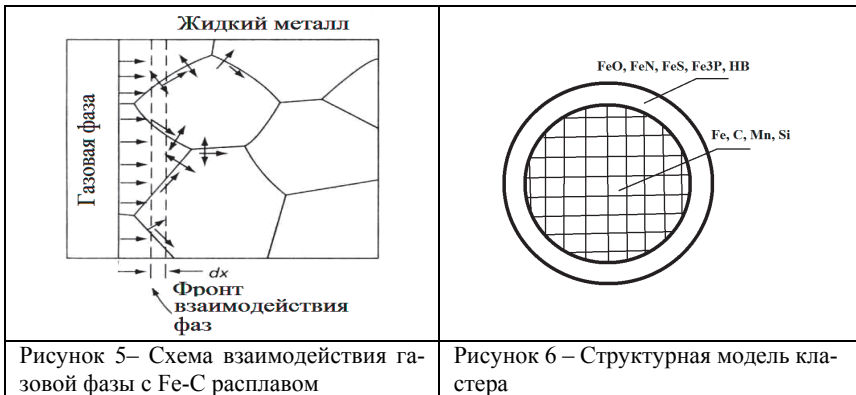
Такое же предположение можно сформулировать и для азота, который при равновесном состоянии может располагаться по границам кластера и

образовывать с железом соединения в виде нитрида железа FeN , которые являются временными образованиями и не проникают в глубину кластера. Анализ показал, что сера и фосфор образуют с железом соединения FeS [7] и Fe_3P [8], которые также находятся на границах кластера и не проникают в его глубину. Кремний и марганец образуют с железом растворы замещения и располагаются внутри кластера [9,10].

Таким образом, результаты проведенного анализа показывают, что такие элементы как углерод, марганец и кремний располагаются преимущественно в твердой зоне упорядоченного расположения атомов, а сера, фосфор, кислород и азот – в разупорядоченной зоне между твердыми кластерами металла. В этом случае железоуглеродистый расплав можно представить в виде твердых частиц, образованных структурными кристаллическими ячейками Fe-C , окруженных энергетически ослабленными границами и прослойками газов, неметаллических расплавов и других образований.

При увеличении температуры расплава размер твердых частиц уменьшается вплоть до молекулы или атома железа, что увеличивает общую площадь энергетически ослабленных границ и, следовательно, при взаимодействии газовой и металлической фаз увеличивает возможность растворения в расплаве большего количества газов (рис.5).

Структурную модель кластера представим схематично в виде шара с кристаллической структурой, на поверхности которого располагается разупорядоченная зона, которая содержит: окислы железа, соединения азота, серы и фосфора с железом, неметаллические включения (рис.6).



Чтобы выявить механизм поведения газов в расплаве выполним ориентировочный расчет размера твердой фазы кластеров. При этом для кислородно-конвертерной плавки в первом приближении примем следующие допущения:

кислород и азот, их окислы и химические соединения, неметаллические включения располагаются в неупорядоченной зоне расплаве и находятся на поверхности S «твердых тел» (кластеров), имеющих объем V ;

в равновесном состоянии элементы разупорядоченной зоны привязаны к кислороду и будут располагаться в один молекулярный слой кислорода;

парциальные концентрации элементов разупорядоченной зоны равны процентному содержанию этих элементов в расплаве;

сера и фосфор являются поверхностно-активными элементами, блокируют приход азота в расплав и вытесняют его с поверхности твердого кластера в разупорядоченную зону. Учитывая малые концентрации серы и фосфора в расплаве в процессе кислородно-конвертерной плавки, при рассмотрении модели кластера этими элементами можно пренебречь;

Анализ процесса выплавки низкоуглеродистой стали при различных вариантах технологии кислородно-конвертерной плавки показывает, что соотношение концентраций кислорода и азота составляет (10-30):1. Это позволяет использовать для расчетов только параметры кислорода.

Исходя из выражения (1) соотношение доли кластеров $\Phi_{\text{кл}}$ и разупорядоченной зоны $\Phi_{\text{раз}}$ можно представить в виде:

$$\Phi_{\text{кл}} / \Phi_{\text{раз}} = M_{\text{кл}} / M_{\text{раз}} \quad (2)$$

где $M_{\text{кл}}$ и $M_{\text{раз}}$ – общая масса кластеров и масса разупорядоченной зоны расплава соответственно.

Используя для расчетов параметры кислорода и принимая, что кластеры железоуглеродистого расплава на 95% состоят из атомов железа, запишем следующее

$$\begin{aligned} M_{\text{кл}} &= M_{\text{Fe}} * m_{\text{Fe}}; \quad M_{\text{раз}} = M_{\text{O}_2} * m_{\text{O}_2} \\ M_{\text{кл}} / M_{\text{раз}} &= M_{\text{Fe}} / M_{\text{O}_2} = \eta_{\text{Fe}} * m_{\text{Fe}} / \eta_{\text{O}_2} * m_{\text{O}_2} \end{aligned} \quad (3)$$

Параметры элементов, участвующих в образовании расплава, имеют следующие значения:

радиус атома железа $R_{\text{ж}}$ равен $156 * 10^{-12}$ см;

радиус атома кислорода $R_{\text{к}}$ равен $48 * 10^{-12}$ см;

радиус атома азота $R_{\text{а}}$ равен $56 * 10^{-12}$ см;

Твердый кластер железоуглеродистого расплава представим в виде шара диаметром $D_{\text{кл}}$ (или $2R_{\text{кл}}$), состоящего из η_{Fe} атомов железа и имеющего объем $V = 4\pi(R_{\text{кл}})^3/3$ и поверхность $S = 4\pi(R_{\text{кл}})^2$.

Тогда $S / V = 4\pi(R_{\text{кл}})^2 * 3 / 4\pi(R_{\text{кл}})^3 = 3 / R_{\text{кл}}$, или $S / V = 6 / D_{\text{кл}}$

Отсюда

$$D_{\text{кл}} = 6 V / S \quad (4)$$

Объем кластера V занимают η_{Fe} атомов железа, атомный радиус которого составляет $R_{\text{Fe}} = 156 * 10^{-12}$ м, т.е

$$V = \eta_{\text{Fe}} (2R_{\text{Fe}})^3. \quad (5)$$

Определенную часть (k_S) поверхности кластера S занимает η_{O_2} атомов кислорода, атомный радиус которого составляет $R_{\text{O}_2} = 48 * 10^{-12}$ м, т.е

$$S = \eta_{\text{O}_2} (2R_{\text{O}_2})^2 / k_S \quad (6)$$

С учетом (3) и (4) диаметр кластера составит

$$D_{\text{кл}} = 6 V / S = 6 (2R_{\text{Fe}})^3 * k_S / (\eta_{\text{O}_2} / \eta_{\text{Fe}}) (2R_{\text{O}_2})^2 \quad (7)$$

Для определения количества растворенного в расплаве кислорода можно принять его как величину равновесного содержания, например, используя общеизвестную формулу равновесного состояния кислорода Вечера-Гамильтона:

$$[\text{O}] * [\text{C}] = 0,025 \quad (8)$$

Однако, для реальных условий сталеплавильного производства растворимость кислорода зависит и от варианта применяемой технологии. Как показано нами в работе [11], для условий кислородно-конвертерной плавки количество растворенного кислорода в расплаве может в 1,5–4 раза превышать равновесное содержание. В этой связи формулу (8) можно представить в виде:

$$[\text{O}]_{\text{ф}} * [\text{C}] = K_{\text{T}} * 0,025 \quad (9)$$

где $[\text{O}]_{\text{ф}}$ – фактическое содержание кислорода в расплаве при содержании углерода $[\text{C}]$;

K_{T} – коэффициент, учитывающий влияние варианта технологии сталеплавильного передела на величину содержания кислорода в Fe–C расплаве, равный $K_{\text{T}} = [\text{O}]_{\text{ф}} / [\text{O}]_{\text{равновесное}}$. По сути K_{T} определяет количество слоев атомов кислорода и азота, которые могут содержаться на поверхности кластера и образовывать разупорядоченную зону расплава, содержащую оксиды и нитриды элементов расплава, а также неметаллические включения.

Величину отношения $\eta_{\text{O}_2} / \eta_{\text{Fe}}$ можно определить по величине равновесной концентрации кислорода в расплаве $\% \text{O}_2$ из соотношения:

$$\% \text{O}_2 = M_{\text{O}_2} / M_{\text{Fe}} = \eta_{\text{O}_2} * m_{\text{O}_2} / \eta_{\text{Fe}} * m_{\text{Fe}}, \quad (10)$$

или

$$(\eta_{\text{O}_2} / \eta_{\text{Fe}}) = M_{\text{O}_2} * m_{\text{O}_2} / M_{\text{Fe}} * m_{\text{Fe}} = \% \text{O}_2 (m_{\text{O}_2} / m_{\text{Fe}}) = \% \text{O}_2 (16/56) \quad (11)$$

где $m_{\text{Fe}} = 56$ – атомная масса железа.

где $m_{\text{O}_2} = 16$ – атомная масса кислорода.

С учетом приведенных выражений диаметр кластера составит:

$$(D_{\text{кл}}) = \frac{6 * (2R_{\text{Fe}})^3 * m_{\text{O}_2} * k_S}{K_{\text{T}} * m_{\text{Fe}} * [\text{O}]_{\text{р}} * (2R_{\text{O}_2})^2} \quad (12)$$

где $[\text{O}]_{\text{равновесное}}$ (или $[\text{O}]_{\text{р}}$) – равновесное содержание кислорода в расплаве при заданном угледе.

Следует отметить, что количество атомов кислорода η_{O_2} , которое может содержаться на поверхности кластера, зависит от многих факторов, в т.ч. и от варианта технологии кислородно-конвертерной плавки. Поэтому отношение K_{T} / k_S может характеризовать фактическое количество атомов кислорода на поверхности кластера ($K_{\text{T}} / k_S = \eta_{\text{ф}} / \eta_{\text{O}_2} = K_{\text{эф}}$) может определять эффективность определенной технологии по возможности достижения равновесного состояния кислорода (азота) в железоуглеродистом рас-

плаве. В практическом плане для определения величины $K_{эф}$ при определенной технологии можно использовать отношение фактического содержания кислорода (азота) к его равновесному содержанию в расплаве.

Исходя из предположения, что для газов существуют одинаковые условия контакта с поверхностью кластера, для равновесного состояния газов в расплаве можно предположить, что атомы газов будут располагаться на поверхности кластера в один атомный слой. Расположение газов в два или более слоев приводит к тому, что они из формы атомов будут переходить в молекулярную форму и иметь больше возможности для удаления из расплава. Наличие атомных слоев более 2 означает, что условия барботирования ванны конвертера недостаточны для удаления лишних слоев газа и свидетельствуют о неравновесном состоянии расплава. Таким образом, величина коэффициента k может служить показателем неравновесного состояния расплава и являться показателем эффективности той или иной технологии кислородно-конвертерной плавки по кислороду или азоту.

Для ориентировочных расчетов в равновесных условиях примем, что $K_T / k_S = 1$, поскольку большее количество слоев атомов кислорода, очевидно, будет создавать более крупные образования кислорода с углеродом (газ CO) и иметь больше возможности для удаления CO из расплава.

Тогда для кислородно-конвертерной ванны металла размер кластера расплава составит:

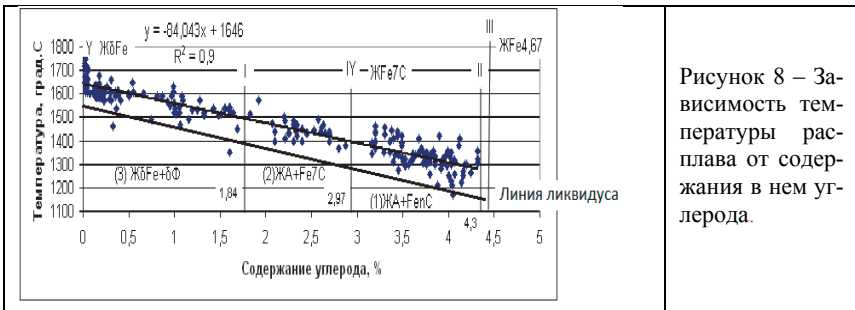
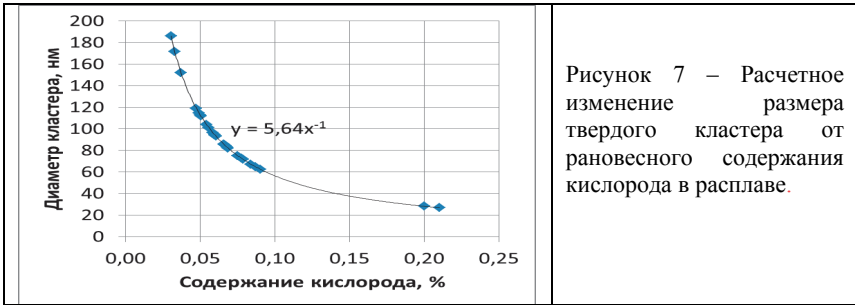
при размерности в метрах

$$(D_{кл}) = \frac{6 \cdot 8 \cdot (156)^3 \cdot 16}{4 \cdot (48)^2 \cdot 56 \cdot 10^{12} \cdot [O]_p}, \text{ м} \quad (13)$$

при размерности в нанометрах:

$$(D_{кл}) = \frac{6 \cdot 8 \cdot (156)^3 \cdot 16}{0,8 \cdot 4 \cdot (48)^2 \cdot 56 \cdot 10^3 \cdot [O]_p}, \text{ нм} = 5,64 / [O]_p \quad (14)$$

Выражение (14) показывает, что увеличение содержания кислорода в процессе кислородно-конвертерной плавки, которое одновременно связано с уменьшением содержания углерода и повышением температуры расплава, связано с уменьшением размера твердого кластера железа (рис.7). Используя полученную в ходе исследований процесса кислородно-конвертерной плавки зависимость температуры расплава от содержания в нем углерода (рис.8), а также зависимость равновесного содержания кислорода от содержания углерода (9), можно построить зависимости размера кластеров от температуры расплава в процессе кислородно-конвертерной плавки (рис.9). Монотонный характер представленной зависимости позволяет предположить, что уже при температуре расплава около 1850°C размеры кластеров существенно уменьшаются и жидкую сталь уже можно рассматривать как гомогенную жидкость.



Таким образом, представленная модель железоуглеродистого расплава показывает, что при анализе процесса кислородно-конвертерной плавки следует учитывать изменение таких параметров:

количество низкоуглеродистой жидкости в расплаве;

динамику изменения основных элементов химического состава расплава и газов в процессе плавки;

величину произведения $[C]*[O]$ и $[C]*[N]$ как характеристику влияния структурного состава расплава на содержание в нем газов по мере снижения содержания $[C]$ и увеличения температуры.



С практической точки зрения использовать полученную информацию можно для выявления условий удаления газов из железоуглеродистого

расплава, в том числе и при использовании следующих методов воздействия на расплав:

температурная и термовременная обработка расплава (определяет возможность удаления оксидов и нитридов с внешних границ кластера);

внешние физические, электрические и магнито-электрические воздействия на расплав (влиянием на коэффициент k_S , величина которого характеризует уровень энергетической ослабленности внешних границ кластера);

перемешивание расплава ванны конвертера путем использования возможностей дутьевых режимов кислородно-конвертерной плавки для усиления барботажа ванны конвертера;

использование особенностей технологии кислородно-конвертерной плавки, способствующих дегазации расплава (выбор варианта технологии, обеспечивающего максимальный барботаж ванны конвертера с соблюдением технологических параметров плавки);

применение методов сверхбыстрой закалки расплавов (скорости охлаждения $\sim 105^\circ\text{C}/\text{с}$ и выше).

Анализируя результаты, приведенные на рис.9, можно сделать вывод о том, что информация о негативной структурной информации от расплава к твердому металлу может быть уменьшена при достижении температуры расплава выше 1850°C . Однако следует учитывать, что в процессе продувки расплава кислородом и азотом резко возрастает их растворимость в жидкой стали. В этом случае следует использовать арсенал средств для внепечной обработки, вакуумирования, нагрева стали в безгазовой атмосфере и достаточной выдержки при высокой температуре и без доступа газов, что способствует удалению кислорода, азота и водорода из расплава.

В частности, приведенные выше данные подтверждают предположение ряда авторов, в т.ч. [12], что группировки кластеров изменяются с изменением температуры, и объясняют причину увеличения гомогенности расплава при увеличении его температуры. Сотрудниками отдела ОФХП ИЧМ показано, что полная гомогенность расплава достигается при полном распаде кластеров, при этом сплав теряет свойства наследственности шихты. Область существования кластерных группировок выше температуры ликвидус, но ниже температуры кипения. По данным этой работы температура полного разупорядочения кластеров составляет $(1,4-2,1) T_{\text{пл}}$. Для описания расплава могут быть использованы модельные параметры Z^y и r_1 в комплексном виде [13].

Следует отметить, что концентрации газов в реальных условиях различных технологий и вариантов кислородно-конвертерной плавки могут существенно отличаться от результатов выполненных расчетов, в т.ч. за счет того, что в разупорядоченной зоне атомы и молекулы элементов расплава могут располагаться не по всей поверхности кластера и не в один

молекулярный слой. Однако такое положение не отменяет сути качественного подхода к определению размеров твердых кластеров в расплаве. Полученные результаты показывают необходимость и пути продолжения исследований в изучении железоуглеродистых расплавов.

Результаты проведенного анализа позволяют сделать следующие выводы. Рассмотрена возможность использования кластерной модели железоуглеродистого расплава для объяснения механизма поведения кислорода и азота в процессе кислородно-конвертерной плавки. Это позволяет выбрать параметры для сравнения и определения эффективности различных вариантов кислородно-конвертерной плавки по кислороду и азоту.

Рассматриваемая модель позволяет объяснить, почему сера и фосфор блокируют приход азота в металл. Располагаясь на поверхности кластера и являясь поверхностно-активными элементами, сера и фосфор вытесняют азот с поверхности твердого кластера в разупорядоченную зону, откуда он имеет возможность быть удаленным из расплава.

Показано, что в процессе кислородно-конвертерной плавки, которая сопровождается уменьшением содержания углерода и повышением температуры расплава, размеры твердых кластеров уменьшаются, а их суммарная площадь поверхностей увеличивается. При этом возникает возможность на большей поверхности кластеров удерживаться большему количеству кислорода и азота, что в конечном итоге приводит к возрастанию их концентрации по мере повышения температуры.

Предложенное объяснение механизма поведения газов показывает пути для продолжения исследований в направлении изучения железоуглеродистых расплавов и позволяет определить направления сравнительной оценки различных вариантов кислородно-конвертерной плавки, в т.ч. и с использованием электрических потенциалом малой мощности.

Заключение. Рассмотрена возможность использования кластерной модели железоуглеродистого расплава для объяснения механизма поведения кислорода и азота в процессе кислородно-конвертерной плавки. Показано, что в процессе кислородно-конвертерной плавки, которая сопровождается уменьшением содержания углерода и повышением температуры расплава, размеры твердых кластеров уменьшаются, а их суммарная площадь поверхностей увеличивается. При этом возникает возможность на большей поверхности кластеров удерживаться большему количеству кислорода и азота, что в конечном итоге приводит к возрастанию их концентрации по мере повышения температуры. Предложенное объяснение механизма поведения газов показывает пути для продолжения исследований в направлении изучения железоуглеродистых расплавов и позволяет определить направления сравнительной оценки различных вариантов кислородно-конвертерной плавки.

1. *Winterfeld, F.*: LD-Prozess und kombinierte Blasverfahren, VDEh-Kon taktstudium 52/1992, Metallurgie des Eisens, Teil 2:Stahlerzeugung.4. Krieger, W.: BMH 148 (2003) Nr. 7, S. 247/53.
2. *Ж.Гугоуанг, Р.Хюскен, Ю.Капель* Длительная кампания конвертера за счет всплеска шлака и эффективное использование технологии донной продувки ТВМ //«Черные металл»», апрель 2013. – С.34-39.
3. *Chuckwulebe, B.; Klimushkin, A. V.; Kuznetsov, G. V.*: Iron Steel Tech. (2006) Nr. 11, S. 45/53., *AISI Steel Foundation* [Hrsg.]: The Making, Shaping and Treating of Steel, 11. Aufl., Pittsburgh, USA, 1998.
4. *Строение металлических жидкостей*: Учебное пособие. Л.А. Жукова. Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2002. 46 с.
5. *Исследование структуры жидкой стали закалочно-микроструктурным методом* / В.С.Лучкин, В.Ф.Поляков, С.И.Семькин, А.Ю.Борисенко, Л.Г.Тубольцев //Сб. тр. ИЧМ. Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. – Вып.24. – 2011. – С.145-156.
6. *Akihiko K., Koin I., Kokichis S.* The stability of oxygen in δ -iron. / Trans Iron and steel inst. Jap. – 1970–10, №2.
7. *Сера* в структуре жидких Fe-C сплавов / В.С.Лучкин, Л.Г.Тубольцев, В.П.Корченко, Н.И.Падун. //Сб. тр. ИЧМ. Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. – Вып.27. – 2013. – С.247-255.
8. *Влияние фосфора на структуру жидких Fe-C сплавов* / В.С.Лучкин, Л.Г.Тубольцев, В.П.Корченко, Н.И.Падун. //Сб. тр. ИЧМ. Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. – Вып.27. – 2013. – С.242-253.
9. *Влияние кремния на структурообразование в жидких Fe-C сплавах* / В.С.Лучкин, В.П.Корченко, Л.Г.Тубольцев, Н.И.Падун. //Сб. тр. ИЧМ. Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. – Вып.25. – 2012. – С.230-242.
10. *Лучкин В.С., Корченко В.П., Тубольцев Л.Г.* Влияние марганца на структурообразование жидких Fe-C сплавов при температурах металлургических перегревов //Сб. тр. ИЧМ. Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. – Вып.26. – 2012. – С.172-180.
11. *Влияние технологий кислородно-конвертерной плавки на качественные показатели стали* / В.Ф.Поляков, Л.Г.Тубольцев, В.П.Корченко, Н.И.Падун, А.А.Семикина //Сб. тр. ИЧМ. Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. – 2014. – Вып 28. – С.179-195.
12. *Тогобицкая Д.Н., Головкин Л.А., Снизура И.Р.* Исследование микронеоднородности однокомпонентных металлических расплавов в области надликвидусных температур на основе параметров межатомного взаимодействия. – VII Международная научно-практическая конференция «Наука в современном мире». – г. Киев, 19 марта 2016 г. – С. 37 – 44.
13. *Снизура И.Р., Тогобицкая Д.Н.* Особенности прогнозирования температур ликвидус и солидус железоуглеродистых сплавов на основе концепции направленной химической связи // Сб. тр. ИЧМ. Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. – 2017. – Вып.31. – С.243-252.

*Статья поступила в редакцию сборника 23.03.2017
и прошла внутреннее и внешнее рецензирование*

Л.Г.Тубольцев, Н.І.Падун, В.О.Горохова

Кластерна модель і поведінка кисню у залізовуглецевому розплаві

У статті розглянута можливість використання кластерної моделі залізовуглецевого розплаву для пояснення механізму поведінки кисню та азоту в процесі киснево-конвертерної плавки. Показано, що з підвищенням температури розплаву розміри твердих кластерів зменшується, а їх сумарна площа поверхонь збільшується. При цьому виникає можливість на більшій поверхні кластерів утримуватися більшої кількості кисню та азоту, що в кінцевому підсумку призводить до зростання їх концентрації у міру підвищення температури.

Ключові слова: залізовуглецевих розплав, кластерна модель, розмір кластера, кисень

L.G.Tuboltsev, N.I.Padun, V.A.Gorohova

Cluster model and behavior of oxygen in iron-carbon melt

The possibility of using the cluster model of iron-carbon melt to explain the mechanism of oxygen and nitrogen behavior in the oxygen-converter melting process is considered in the article. It is shown that with increasing melt temperature, the sizes of clusters decrease, and their total surface area increases. In this case, it becomes possible to retain more of the oxygen and nitrogen on a larger surface of the clusters, which ultimately leads to an increase in their concentration as the temperature rises.

Keywords: iron-carbon melt, the cluster model, cluster size, oxygen