

УДК 669:541.1

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЛАВА ОКСИДНО-ФТОРИДНОЙ ПРОМЫШЛЕННОЙ ШЛАКООБРАЗУЮЩЕЙ СМЕСИ

*Гельчинский Б.Р.¹, д.ф.-м.н., профессор, заведующий лабораторией порошковых,
композиционных и наноматериалов (brg47@list.ru)*

*Дюльдина Э.В.², к.т.н., доцент, профессор кафедры металлургии и химической технологии
Леонтьев Л.И.^{1,3,4}, академик РАН, советник, д.т.н., профессор, главный научный сотрудник*

¹Институт металлургии УрО РАН

(620016, Россия, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101)

²Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова

(455000, Россия, Челябинская обл., Магнитогорск, пр. Ленина, 38)

³Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

(119049, Россия, Москва, Ленинский пр., 4)

⁴Президиум РАН

(119991, Россия, Москва, Ленинский пр., 14)

Аннотация. В данной работе обсуждаются результаты молекулярно-динамического моделирования расплава многокомпонентной окисно-фторидной системы $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-Na}_2\text{O-K}_2\text{O-CaF}_2\text{-FeO}$, соответствующей составу промышленной шлакообразующей смеси (ШОС), используемой при разливке стали для наведения шлака в кристаллизаторе машины непрерывного литья заготовок. Химический состав ШОС, % (по массе): 35,35 SiO_2 ; 30,79 CaO ; 8,58 Al_2O_3 ; 1,26 MgO ; 13,73 CaF_2 ; 7,57 Na_2O ; 0,88 K_2O ; 1,82 FeO . С учетом этих концентраций был проведен пересчет состава на мольные доли и вычислено соответствующее число ионов в модели для каждого компонента. Моделирование восьмикомпонентного окисно-фторидного расплава размером 2003 иона в основном кубе (длина ребра 31,01 Å) с периодическими граничными условиями проведено при экспериментально определенной температуре начала затвердевания (1257 К) и фиксированном объеме. Кулоновское взаимодействие учитывали методом Эвальда-Хансена. Шаг по времени равнялся $0,05t_0$, где t_0 – внутренняя единица времени, равная $7,608 \cdot 10^{-14}$ с. Плотность расплава ($3,04 \text{ г/см}^3$) принимали на основании собственных экспериментальных данных. Потенциалы межатомного взаимодействия были выбраны в форме Борна-Майера. По результатам моделирования определена структура субкристаллических группировок атомов, присутствующих в расплаве при температуре начала затвердевания. Проведено обсуждение результатов моделирования и их сопоставление с литературными данными. Показано, что компьютерная модель позволяет получить достаточно реалистичную картину атомной структуры шлакового расплава, свидетельствующую о том, что основной структурной составляющей всех силикатных систем является кремнекислородный тетраэдр. Тетраэдры в силикатах находятся либо в виде изолированных друг от друга структурных единиц, либо, соединяясь между собой через вершины, образуют комплексные анионы, что согласуется с теорией шлаковых расплавов. Молекулярно-динамическое моделирование позволяет получить адекватную информацию о структуре расплава определенного химического состава.

Ключевые слова: окисно-фторидные расплавы, многокомпонентные, структура, свойства, компьютерное моделирование.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-719-724

ВВЕДЕНИЕ

Многокомпонентные окисные и окисно-фторидные шлакообразующие смеси (ШОС) широко применяются в сталеплавильном производстве для решения многих задач, таких как изоляция металла от контакта с воздухом, удаление нежелательных компонентов из металла в процессе разливки, улучшение качества непрерывнолитых заготовок и слэбов и т. д. Металлургическими предприятиями и организациями – производителями ШОС постоянно ведутся работы по созданию новых и совершенствованию существующих ШОС с целью повышения эффективности их применения в соответствии с конкретными условиями и задачами производства [1 – 6]. Для разработки более эффектив-

ных ШОС необходимо знать фундаментальные закономерности, определяющие их физико-химические и технологические свойства. Такую информацию может дать микроскопическая теория расплавов и современные методы компьютерного моделирования. В данной работе обсуждаются результаты молекулярно-динамического (МД) моделирования расплава многокомпонентной окисно-фторидной системы, соответствующей по химическому составу промышленной шлакообразующей смеси, используемой при разливке стали для наведения шлака в кристаллизаторе машины непрерывного литья заготовок. По результатам моделирования определена структура субкристаллических группировок атомов, присутствующих в расплаве при температуре начала затвердевания. Проведено обсуждение полученных ре-

зультатов и их сопоставление с литературными данными [7 – 10].

МЕТОДИКА КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Выполнено МД моделирование восьмикомпонентного оксидно-фторидного расплава, соответствующего химическому составу промышленной ШОС марки Accutherm ST-SP/601-A, % (по массе): 35,35 SiO₂; 30,79 CaO; 8,58 Al₂O₃; 1,26 MgO; 13,73 CaF₂; 7,57 Na₂O; 0,88 K₂O; 1,82 FeO. С учетом этих концентраций проведен пересчет состава на мольные доли и вычислено соответствующее число ионов в модели для каждого компонента. Система состояла из 2003 атомов в основном кубе (длина ребра 31,011 Å), установлены периодические граничные условия. Кулоновское взаимодействие учитывали методом Эвальда-Хансена [11]. Шаг по времени равнялся 0,05 t_0 , где t_0 – внутренняя единица времени, равная 7,608·10⁻¹⁴ с. Плотность расплава 3,04 г/см³ при температуре начала затвердевания (1257 К) принимали на основании собственных экспериментальных данных [12]. Потенциалы межчастичного взаимодействия были выбраны в форме Борна-Майера:

$$u_{ij}(r) = \frac{Z_i Z_j e^2}{r} + B_{ij} \exp\left(-\frac{r}{\rho_{ij}}\right) + \frac{C_{ij}}{r^6},$$

где r – расстояние между центрами ионов; Z_i – заряд i -го иона в единицах элементарного заряда e ; B_{ij} и ρ_{ij} – параметры отталкивания ионных оболочек частиц i и j ; C_{ij} – параметры эффективного диполь-дипольного взаимодействия.

Заряды ионов приняли следующими: 4,00 для Si; –2,00 для кислорода; 3,00 для Al; 2,00 для Ca, Mg и Fe; 1,00 для Na и K; –1,00 для F. Параметры B_{ij} для различных пар ионов одинакового знака (кроме пар O–O) приняли равными нулю, поскольку эти пары из-за кулоновского отталкивания находятся на большом расстоянии. Для пары O–O значение B_{ij} взяли из работы [13]. Остальные параметры B_{ij} приведены в обзоре [11]. Все коэффициенты $\rho_{ij} = 0,29$ Å [11].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Основными структурными характеристиками некристаллических многокомпонентных систем являются парциальные парные корреляционные функции (ППКФ) $g_{ij}(r)$, описывающие вероятность обнаружения пары частиц сортов i и j на расстоянии r . Они нормированы так, что при $r \rightarrow \infty$ все $g_{ij}(r) \rightarrow 1$. Эти функции непосредственно рассчитываются в методе молекулярной динамики.

Базовую информацию о структуре моделируемого расплава дают ППКФ для пар Si–O и Al–O, показанные на рис. 1. Они имеют четкий и высокий пик в ин-

тервале расстояний от 1,4 до 2,0 Å, за которым находится широкая область нулевого значения функции. Это свидетельствует о том, что ионы Si⁴⁺ и Al³⁺ окружены притянутыми к ним ионами O²⁻, образующими своеобразную оболочку. Такие группировки из этих ионов участвуют в структурообразовании расплава как самостоятельные структурные единицы. Координаты пиков указывают среднее расстояние между центральными ионами Si⁴⁺ и Al³⁺ и кислородным окружением, составляющее 1,55 и 1,65 Å соответственно. Значение 1,55 Å близко к расстоянию Si–O в природных силикатах, равному 1,6 Å. Количество ионов O²⁻, окружающих ионы Si⁴⁺ и Al³⁺ (так называемое координационное число Z), находится интегрированием ППКФ по ширине первого пика. Для пиков ППКФ Si⁴⁺ и Al³⁺ численное интегрирование дает величину Z , равную 3,75 и 3,23 соответственно. Эти значения близки к 4, т.е. ионы Si⁴⁺ и Al³⁺ окружены обычно четырьмя ионами O²⁻ и в расплаве присутствуют кремне- и алюмокислородные тетраэдры. Средние размеры тетраэдров (расстояние между центрами ионов кислорода в тетраэдре) находятся по максимуму на кривой ППКФ для пары O–O, также показанному на рис. 1 и составляющему 2,55 Å.

Небольшое отличие координационного числа 3,75 для кремния, полученного по результатам моделирования, от значения 4, вероятно связано с тем, что в некоторых кремнекислородных тетраэдрах ионы O²⁻ замещены практически равновеликими ионами F¹⁻. Более значительное отличие от значения 4 координационного числа пары Al–O несомненно связано с тем, что в алюмосиликатах алюминий находится не только в тетраэдрах, но и вне их, выполняя роль связки, аналогичную, например, ионам кальция.

Согласно современным теоретическим представлениям, субкристаллические анионные комплексы, состоящие из кремне- и алюмокислородных тетраэдров,

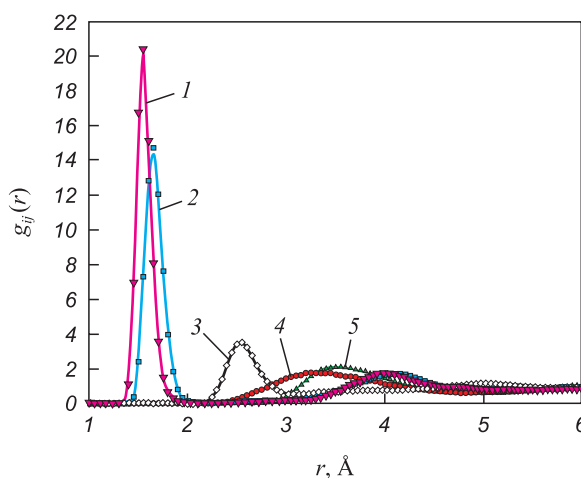


Рис. 1. Парциальные парные корреляционные функции для пар Si–O (1), Al–O (2), O–O (3), Na–Na (4) и Ca–Ca (5)

Fig. 1. Partial pair correlation functions for pairs: Si–O (1), Al–O (2), O–O (3), Na–Na (4) and Ca–Ca (5)

соединяются друг с другом в основном ионами кальция. Большое сходство ППКФ для пар Ca–Ca и Na–Na (см. рис. 1) указывает на тот факт, что в соединительной функции принимают практически равное участие и ионы кальция, и ионы натрия. Ионные радиусы этих элементов различаются незначительно: 1,01 Å для кальция и 0,98 Å для натрия, что дает им возможность замещать друг друга без существенного искажения кристаллической решетки.

При небольших перегревах над температурой ликвидус в шлаковых расплавах возникают субкристаллические анионные группировки, аналогичные природным минералам. Тип анионных группировок, образовавшихся в моделируемой системе алюмосиликата, можно определить по параметрам ППКФ пар Si–Si, Si–Al и Al–Al (рис. 2).

На кривых, представленных на рис. 2, имеется по одному пику ППКФ, соответствующему двум ближайшим атомам каждой пары, а также по одному локальному максимуму, соответствующему расположению двух более удаленных атомов пары. Расстояние между двумя ближайшими атомами пар Si–Si, Si–Al и Al–Al в среднем составляет 3,15, 3,20 и 3,15 Å соответственно, что равно удвоенному расстоянию между ионами этих элементов и кислорода в тетраэдрах. Положение вторых максимумов кривых ППКФ рассматриваемых пар атомов составляет 5,45, 5,85 и 5,45 Å, что равно удвоенной длине ребра тетраэдров.

Следует отметить, что положение и высота пиков ППКФ для ряда оксидов, дающих основной вклад в интегральную ПКФ, например, SiO₂, FeO, MgO, CaO, Al₂O₃, Na₂O хорошо согласуются с данными дифракционного эксперимента для соответствующих расплавов [14]. Из экспериментальных исследований шлаковых систем, использующих химический и рентгеноструктурный анализ, а также из теории шлаков из-

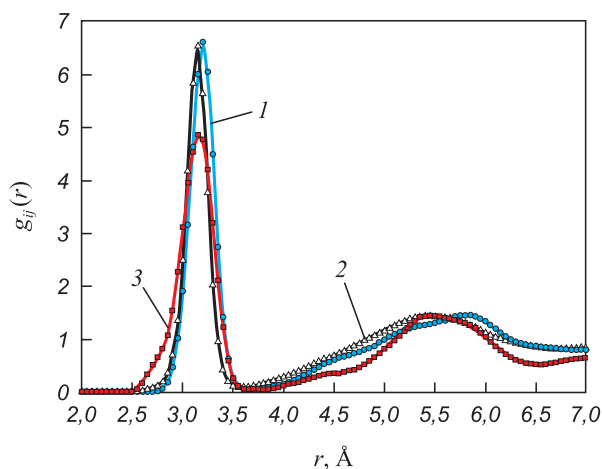


Рис. 2. Парциальные парные корреляционные функции для пар Si–Al (1), Si–Si (2) и Al–Al (3)

Fig. 2. Partial pair correlation functions for pairs: Si–Al (1), Si–Si (2) and Al–Al (3)

вестно [15–21], что в минералах, как и в большинстве неорганических соединений, отсутствуют замкнутые группировки атомов в виде самостоятельных молекул и что частицами, составляющими кристаллы, являются преимущественно ионы. Так, в узлах кристаллических решеток оксидов металлов располагаются катионы последних и анионы кислорода. Установлено, что основной структурной составляющей всех силикатных систем является кремнекислородный тетраэдр SiO₄^{4–}, в вершинах которого располагаются четыре крупных аниона O^{2–}, а в центре – маленький высокочарядный катион Si⁴⁺. Тетраэдры в силикатах находятся либо в виде изолированных друг от друга структурных единиц, либо, соединяясь между собой через вершины, образуют комплексные анионы (рис. 3, а, б).

Это положение теории хорошо подтверждают данные визуализации ионной структуры, полученные авторами по результатам компьютерного моделирования. На рис. 3, в показан фрагмент системы Si–O–Al в форме шаров и стержней. Хорошо видна тетраэдрическая цепочка, в которой два соседних тетраэдра кремния и алюминия имеют один общий ион кислорода. Следовательно, эти тетраэдры соединены в цепочки, близкие к цепочкам природного минерала волластонита. Цепочечная структура группировок, состоящих из кремне- и алюмокислородных тетраэдров, подтверждается еще тем, что координационное число для всех пар Si–Si, Al–Al и Si–Al близко к двум.

В моделируемой системе в довольно большом количестве присутствуют атомы фтора, причем их ППКФ

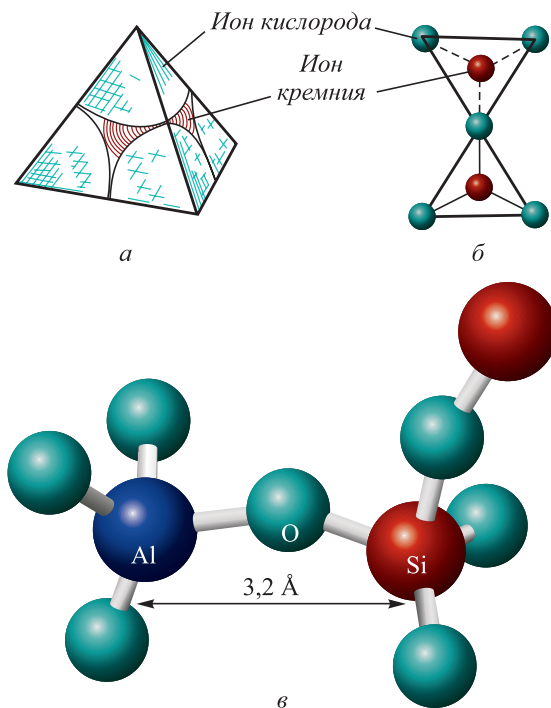


Рис. 3. Кремнекислородные (а, б) [16] и кремне-алюмокислородные (в) тетраэдры

Fig. 3. Silicon-oxygen (a, b) [16] and silica-alumina tetrahedra (v)

принципиально отличается от аналогичных функций всех других элементов (рис. 4).

Из рис. 4 видно, что ППКФ для пары F–F мало отклоняется от единицы, т. е. фтор относительно равномерно распределен по объему расплава. Однако наблюдается некоторая тенденция к замещению фтором кислорода в некоторых тетраэдрах, а также к сближению ионов фтора с ионами кальция в промежутках между анионными цепочками, состоящими из тетраэдров. Присутствие отрицательно заряженных ионов фтора вместе с ионами кальция и натрия в промежутках между цепочками тетраэдров ослабляет связь этих цепочек друг с другом, что объясняет хорошо известный факт уменьшения вязкости шлаковых расплавов при введении в них фторсодержащих компонентов. Фактическое совпадение результатов моделирования со свойствами реальных ШОС дает основание полагать, что по данным моделирования уже сейчас можно предлагать конкретные рекомендации, например увеличить содержание фтора и/или натрия и калия для уменьшения вязкости расплава.

Относительно небольшие пики ППКФ для пар Ca–F и Si–F дают основание полагать, что в расплаве присутствуют ионные группировки, близкие по структуре к кустидину, имеющему минералогическую формулу $\text{Ca}_4(\text{Si}_2\text{O}_7)\text{F}_2$. Наличие кустидина в затвердевших фторсодержащих шлаках установлено экспериментально рентгенофазовым анализом [10].

Выводы

Основываясь на экспериментальных данных о плотности, в приближении модели ионной связи проведено молекулярно-динамическое моделирование восьми-

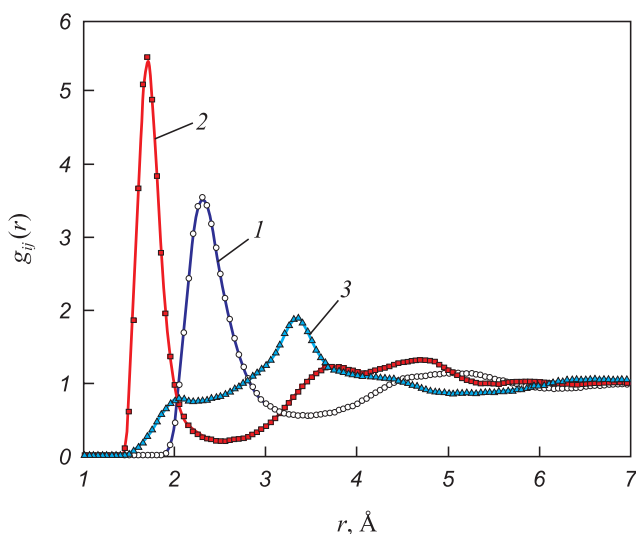


Рис. 4. Парциальные парные корреляционные функции для пар Ca–F (1), Si–F (2) и F–F (3)

Fig. 4. Partial pair correlation functions for pairs: Ca–F (1), Si–F (2) and F–F (3)

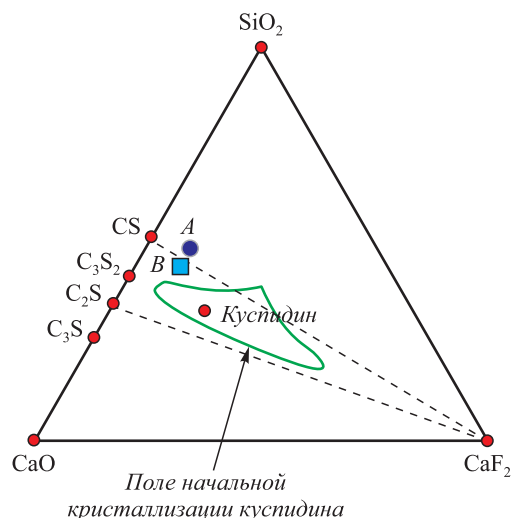


Рис. 5. Состав шлака на фазовой диаграмме тройной системы [10]

Fig. 5. Slag composition in phase diagram of the ternary system [20]

компонентного оксидно-фторидного расплава при температуре ликвидус.

Показано, что компьютерная модель позволяет получить достаточно реалистичную картину атомной структуры шлакового расплава, которая по основным параметрам (положение и высота пиков парциальных ПКФ) хорошо согласуется с данными дифракционного эксперимента. Молекулярно-динамическое моделирование позволяет получить адекватную информацию о структуре расплава определенного химического состава, что облегчает подбор шлакообразующих смесей для конкретных условий их использования.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Филиппов А.В., Дидович С.В., Селиванов В.Н. Шлакообразование в кристаллизаторе слывовой МНЛЗ // Проблемы черной металлургии и материаловедения. 2013. № 4. С. 40 – 42.
2. Макуров С.Л., Смирнов А.Н., Епишев М.В., Шлемко С.В. Исследование и оптимизация технологических свойств шлакообразующих смесей для непрерывной разливки стали с повышенной скоростью // Изв. вуз. Черная металлургия. 2010. № 12. С. 13 – 16.
3. Экхардт Д., Бехманн Д. Выбор шлакообразующих смесей для непрерывной разливки стали // Сталь. 2008. № 11. С. 19 – 22.
4. Суворов С.А., Вихров Е. А. Совершенствование ШОС для кристаллизаторов МНЛЗ // Сталь. 2010. № 4. С. 38 – 42.
5. Дюльдина Э.В., Селиванов В.Н., Лозовской Е.П., Коротин А.В. Исследование шлакообразования в промежуточном ковше МНЛЗ // Изв. вуз. Черная металлургия. 2013. № 5. С. 7 – 11.
6. Суворов С.А., Ордин В.Г., Ерошкин С.Б., Вихров Е.А. Кристаллизационная способность как критерий выбора ШОС в зависимости от марочного сортамента непрерывнолитых сталей // Сталь. 2010. № 12. С. 14 – 19.
7. Zhou Lejun, Wang Wanlin, Wei Juan, Lu Boxun. Effect of Na_2O and B_2O_3 on heat transfer behavior of low fluorine mold flux for casting medium carbon steels // ISIJ International. 2013. Vol. 53. No. 4. P. 665 – 672.
8. Wen Guang Hua, Zhu Xin Bai, Tang Ping etc. Influence of raw material type on heat transfer and structure of mold slag // ISIJ International. 2011. Vol. 51. No. 7. P. 1028 – 1032.

9. Takahira N., Hanao M., Tsukaguchi Y. Viscosity and solidification temperature of SiO_2 -CaO- Na_2O melts for fluorine free mould flux // *ISIJ International*. 2013. Vol. 53. No. 5. P. 818 – 822.
10. Hanao Masahito. Influence of basicity of mold flux on its crystallization rate // *ISIJ International*. 2013. Vol. 53. No. 4. P. 648 – 654.
11. Белашенко Д.К. Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ. – М.: МИСИС, 2005. – 408 с.
12. Дюльдина Э.В., Селиванов В.Н., Лозовский Е.П. и др. Физико-химические свойства расплавов шлакообразующих смесей, используемых при непрерывной разливке стали // *Расплавы*. 2009. № 6. С. 3 – 10.
13. Белашенко Д.К., Сапожникова С.Ю. Компьютерное моделирование структуры, термодинамических свойств и механизма переноса ионов в криолит-глиноземных расплавах // *Журнал физической химии*. 1997. Т. 71. № 6. С. 1036 – 1040.
14. Пастухов Э.А., Ватолин Н.А., Лисин В.Л. и др. Дифракционные исследования строения высокотемпературных расплавов. – Екатеринбург: УрОПАН, 2003. – 355 с.
15. Deer W.A., Howie R.A., Zussman J. *Rock-Forming Minerals*. Vol. 2: Chain silicates. Longmans Green and Co, 1963. – 379 p.
16. Гольдштейн Н.Л. Краткий курс теории металлургических процессов. – Свердловск: Металлургиздат, 1961. – 334 с.
17. Есин О.А., Гельд П.В. Физическая химия пирометаллургических процессов. Ч. 2. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Металлургия, 1966. – 702 с.
18. Masson C.R., Smith I.B., Whiteway S.G. Molecular size distribution in multichain polymers: application of polymer theory to silicate melts // *Can J. Chem.* 1970. Vol. 48. P. 1456 – 1464.
19. Gaskell D.R. Activities and free energies of mixing in binary silicate melts // *Met. Trans.* 1977. Vol. 8B. No. 1. P. 131 – 145.
20. Elfsberg J., Matsushita T. Measurements and calculation of interfacial tension between commercial steels and mould flux slags // *Steel Research International*. 2011. Vol. 82. No. 4. P. 404 – 414.
21. Singh D., Bhardwaj P., Yang Y.D. etc. The influence of carbonaceous material on the melting behaviour of mould powder // *Steel Research International*. 2010. Vol. 81. No. 11. P. 974 – 979.

Поступила в редакцию 31 июля 2019 г.

После доработки 4 августа 2019 г.

Принята к публикации 6 августа 2019 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2019. Vol. 62. No. 9, pp. 719–724.

MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF THE MELT OF OXIDE-FLUORIDE INDUSTRIAL SLAG-FORMING MIXTURE

B.R. Gel'chinskii¹, E.V. Dyul'dina², L.I. Leont'ev^{1,3,4}

¹ Institute of Metallurgy, UB RAS, Ekaterinburg, Russia

² Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Chelyabinsk Region, Russia

³ National University of Science and Technology "MISIS" (MISIS), Moscow, Russia

⁴ Scientific Council on Metallurgy and Metal Science of Russian Academy of Sciences (Department of Chemistry and Material Sciences), Moscow, Russia

Keywords: oxide-fluoride melts, multicomponent, structure, properties, computer simulation.

DOI: 10.17073/0368-0797-2019-9-719-724

REFERENCES

1. Filippov A.V., Didovich S.V., Selivanov V.N. Slag formation in the mold of slab CCM. *Problemy chernoi metallurgii i materialovedeniya*. 2013, no. 4, pp. 40–42. (In Russ.).
2. Makurov S.L., Smirnov A.N., Epishev M.V., Shlemko S.V. The study and optimization of technological properties of slag-forming mixtures for steel high-speed continuous casting. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2010, no. 12, pp. 13–16. (In Russ.).
3. Ekkhardt D., Bekhmann D. Selection of slag-forming mixtures for continuous casting of steel. *Stal'*. 2008, no. 11, pp. 19–22. (In Russ.).
4. Suvorov S.A., Vikhrov E. A. Improvement of slag-forming mixtures for continuous-casting machine molds. *Steel in Translation*. 2010, vol. 40, no. 4, pp. 341–346.
5. Dyul'dina E.V., Selivanov V.N., Lozovskoi E.P., Korotin A.V. Investigation of slag formation in the tundish of continuous caster. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2013, no. 5, pp. 7–11. (In Russ.).
6. Suvorov S.A., Ordin V.G., Eroshkin S.B., Vikhrov E.A. Solidification properties in the selection of slag-forming mixtures for continuous-cast steel of different grades. *Steel in Translation*. 2010, vol. 40, no. 12, pp. 1070–1076.
7. Zhou Lejun, Wang Wanlin, Wei Juan, Lu Boxun. Effect of Na_2O and B_2O_3 on heat transfer behavior of low fluorine mold flux for casting medium carbon steels. *ISIJ International*. 2013, vol. 53, no. 4, pp. 665–672.
8. Wen Guang Hua, Zhu Xin Bai, Tang Ping, Yang Bo, Yu Xiong. Influence of raw material type on heat transfer and structure of mold slag. *ISIJ International*. 2011, vol. 51, no. 7, pp. 1028–1032.
9. Takahira N., Hanao M., Tsukaguchi Y. Viscosity and solidification temperature of SiO_2 -CaO- Na_2O melts for fluorine free mould flux. *ISIJ International*. 2013, vol. 53, no. 5, pp. 818–822.
10. Hanao M. Influence of basicity of mold flux on its crystallization rate. *ISIJ International*. 2013, vol. 53, no. 4, pp. 648–654.
11. Belashchenko D.K. *Komp'yuternoe modelirovaniye zhidkikh i amorfnykh veshchestv* [Computer simulation of liquid and amorphous substances]. Moscow: MISIS, 2005, 408 p. (In Russ.).

Abstract. The paper discusses the results of molecular dynamic simulation of a melt of the multicomponent oxide-fluoride system $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-Na}_2\text{O-K}_2\text{O-CaF}_2\text{-FeO}$, corresponding to composition of industrial slag-forming mixture (SFM) used in steel casting for slag targeting in the mold of a continuous casting machine (in wt %: 35.35 % SiO_2 , 30.79 % CaO , 8.58 % Al_2O_3 , 1.26 % MgO , 13.73 % CaF_2 , 7.57 % Na_2O , 0.88 % K_2O , and 1.82 % FeO). These concentrations were converted to mole fractions, and the number of ions was calculated for each of the components in the model. An eight-component oxide-fluoride melt containing 2003 ions in the main cube with a side length of 31.01 Å was simulated under periodic boundary conditions at an experimentally determined solidification onset temperature of 1257 K at constant volume. Coulomb interaction was taken into account by the Ewald-Hansen method. The time step was $0.05t_0$, where $t_0 = 7,608 \cdot 10^{-14}$ s is the internal unit of time. The melt density was taken to be 3.04 g/cm^3 based on our experimental data. The interparticle interaction potentials were chosen in the Born-Mayer form. Based on the simulation results, the structure of subcrystalline groups of atoms present in the melt at the temperature of solidification onset was determined. A discussion of the simulation results and their comparison with the literature data was held. It is shown that the computer model allows one to obtain a fairly realistic picture of atomic structure of the slag melt, indicating that the main structural component of all silicate systems is silicon-oxygen tetrahedron. Tetrahedra in silicates are either in the form of structural units isolated from each other, or, connecting together through peaks, they form complex anions. It is consistent with the theory of slag melts. Molecular-dynamic simulation allows one to obtain adequate information on structure of the melt of a certain chemical composition.

12. Dyul'dina E.V., Selivanov V.N., Lozovskii E.P., Istomin S.A., Ryabov V.V., Chentsov V.P. Physico-chemical properties of melts of slag-forming mixtures used in continuous casting of steel. *Rasplavy*. 2009, no. 6, pp. 3–10. (In Russ.).
13. Belashchenko D.K., Sapozhnikova S.Yu. Computer simulation of the structure and thermodynamic properties of cryolite-alumina melts and the mechanism of ion transfer. *Zhurnal Fizicheskoi Khimii*. 1997, vol. 71, no. 6, pp. 1036–1040. (In Russ.).
14. Pastukhov E.A., Vatolin N.A., Lisin V.L. etc. *Difraktsionnye issledovaniya stroeniya vysokotemperaturnykh rasplavov* [Diffraction studies of the structure of high-temperature melts]. Ekaterinburg: UrO RAN, 2003, 355 p. (In Russ.).
15. Deer W.A., Howie R.A., Zussman J. *Rock-Forming Minerals*. Vol. 2: Chain silicates. Longmans Green and Co, 1963, 379 p.
16. Gol'dshtein N.L. *Kratkii kurs teorii metallurgicheskikh protsessov* [A short course in the theory of metallurgical processes]. Sverdlovsk: Metallurgizdat, 1961, 334 p. (In Russ.).
17. Esin O.A., Gel'd P.V. *Fizicheskaya khimiya pirometallurgicheskikh protsessov: ch. 2* [Physical chemistry of pyrometallurgical processes: Part.2]. Moscow: Metallurgiya, 1966, 702 p. (In Russ.).
18. Masson C.R., Smith I.B., Whiteway S.G. Molecular size distribution in multichain polymers: application of polymer theory to silicate melts. *Can J. Chem.* 1970, vol. 48, pp. 1456–1464.
19. Gaskell D.R. Activities and free energies of mixing in binary silicate melts. *Met. Trans.* 1977, vol. 8B, no. 1, pp. 131–145.
20. Elfsberg J., Matsushita T. Measurements and calculation of interfacial tension between commercial steels and mould flux slags. *Steel Research International*. 2011, vol. 82, no. 4, pp. 404–414.
21. Singh D., Bhardwaj P., Yang Y.D., McLean A., Hasegawa M., Iwase M. The influence of carbonaceous material on the melting behaviour of mould powder. *Steel Research International*. 2010, vol. 81, no. 11, pp. 974–979.

Information about the authors:

B.R. Gel'chinskii, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Professor, Head of the Laboratory of Powder, Composite and Nanomaterials (brg47@list.ru)
E.V. Dyul'dina, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor, Professor of the Chair “Metallurgy and Chemical Engineering”
L.I. Leont'ev, Dr. Sci. (Eng.), Professor, Academician, Adviser of the Russian Academy of Sciences

Received July 31, 2019

Revised August 4, 2019

Accepted August 6, 2019