



УДК 669.046.58

DOI 10.17073/0368-0797-2025-1-76-83



Оригинальная статья

Original article

РАЗВИТИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОКСИДНЫХ И МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ

О. Ю. Шешуков^{1,2}, В. Н. Невидимов¹, И. В. Некрасов¹,
А. А. Метелкин¹, В. С. Цепелев¹

¹ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина (Россия, 620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19)

² Институт металлургии Уральского отделения РАН (Россия, 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101)

✉ o.j.sheshukov@urfu.ru

Аннотация. В работе сделана попытка анализа исторического развития научных взглядов на строение оксидных и металлических расплавов. Авторы на примере работ Уральской научной школы и собственных исследований рассматривают эволюцию подходов на основе полимерной (ионной) теории оксидных расплавов и кластерной теории жидких металлов. Показана возможность применения полимерной модели для определения границы перехода шлака из гомогенного состояния в гетерогенное и условий формирования гомогенного шлака, обладающего максимальными рафинирующими свойствами. В рассматриваемых условиях оксид Al_2O_3 может проявлять как основные, так и кислотные свойства. При содержании Al_2O_3 до 16 % в оксидных расплавах, соответствующих шлакам, формируемым в агрегате ковш–печь, глинозем проявляет основные свойства, а при содержании более 16 % он начинает проявлять кислотные свойства. Дополнительно информация об активностях компонентов оксидного расплава позволяет определить параметры шлака, обладающего оптимальными свойствами для поглощения неметаллических включений. Металлический расплав характеризуется «критической» температурой, при которой он в ходе нагрева переходит от наследственной неравновесности кластерного типа в состояние термодинамического равновесия, т.е. происходит гомогенизация расплава. Неравновесные расплавы временно сохраняют в себе элементы структур исходных фаз. Перегрев металла выше «критической» температуры в ходе термовременной обработки позволяет добиться повышения и стабилизации качества продукции. Модифицирование расплава приводит к существенному снижению необходимого перегрева и ускорению процесса формирования гомогенного расплава. На примере исследования свойств и строения металлических жидкостей показано развитие нового прикладного направления под общим названием «термовременная обработка».

Ключевые слова: полимерная модель, оксидный расплав, рафинирующие свойства, кластер, жидкий металл, термовременная обработка

Для цитирования: Шешуков О.Ю., Невидимов В.Н., Некрасов И.В., Метелкин А.А., Цепелев В.С. Развитие исследований физико-химических свойств оксидных и металлических расплавов. *Известия вузов. Черная металлургия*. 2025;68(1):76–83.

<https://doi.org/10.17073/0368-0797-2025-1-76-83>

DEVELOPMENT OF RESEARCH ON THE PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF OXIDE AND METAL MELTS

O. Yu. Sheshukov^{1,2}, V. N. Nevidimov¹, I. V. Nekrasov¹,
A. A. Metelkin¹, V. S. Tsepelev¹

¹ Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin (19 Mira Str., Yekaterinburg 620002, Russian Federation)

² Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences (101 Amundsena Str., Yekaterinburg 620016, Russian Federation)

✉ o.j.sheshukov@urfu.ru

Abstract. The paper considers the historical development of scientific views on the structure of oxide and metal melts. The authors, using the research of the Ural Scientific School and their own works as examples, examine the evolution of approaches based on the polymer (ionic) theory of oxide melts and the cluster theory of liquid metals. The possibility of using a polymer model to determine the boundary of slag transition from a homogeneous state to a heterogeneous one and conditions for the formation of a homogeneous slag with maximum refining properties is shown. Al_2O_3 can exhibit

both basic and acidic properties. It was found that with Al_2O_3 content of up to 16 % in oxide melts corresponding to the slags formed in ladle furnace unit, alumina exhibits basic properties, and when its content exceeds more than 16 %, it begins to exhibit acidic properties. Additional information on activities of the oxide melt components allows us to determine the parameters of the slag with the best properties for non-metallic inclusions absorption. Metal melt is characterized by a “critical” temperature at which the melt during heating transitions from hereditary cluster-type disequilibrium to a state of thermodynamic equilibrium, i.e., the melt “homogenizes”. Nonequilibrium melts temporarily retain elements of the structures of the initial phases. Overheating of the metal above the “critical” temperature during thermal-time treatment makes it possible to improve and stabilize the quality of products. Modification of the melt leads to a significant decrease in the amount of necessary overheating and acceleration of the homogeneous melt formation. Fundamental studies of the properties and structure of metal liquids showed the development of a new applied direction under the general name “thermal-time treatment”.

Keywords: polymer model, oxide melt, refining properties, cluster, liquid metal, thermal-time treatment

For citation: Sheshukov O.Yu., Nevidimov V.N., Nekrasov I.V., Metelkin A.A., Tsepelev V.S. Development of research on the physico-chemical properties of oxide and metal melts. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2025;68(1):76–83. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2025-1-76-83>

ВВЕДЕНИЕ

Необходимость дальнейшего совершенствования сталеплавильных процессов не вызывает сомнений, в то же время создание новых эффективных технологий возможно только на основе анализа экспериментальных данных и понимания их физико-химической сущности. Необходимо дальнейшее развитие различных научных школ и направлений на основе совершенствования теории металлургических процессов.

Металлургические предприятия и научные центры Уральского региона традиционно играют существенную роль в развитых отраслях экономики страны. В настоящей работе сделана попытка анализа исторического развития исследований физико-химических свойств оксидных и металлических расплавов.

МАТЕРИАЛ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Информацию о структуре оксидных расплавов, являющихся основой сталеплавильных шлаков, можно получить как экспериментальными методами исследований, так и проверяя применимость на практике различных теоретических моделей. При изучении существующих теоретических моделей строения шлаковых расплавов более подробно, с нашей точки зрения, следует рассмотреть полимерную модель.

Предположение о том, что оксидные расплавы являются полимерными, было сделано профессором О.А. Есиным еще в 1946 г. [1]. Исходя из ионной природы, О.А. Есин считал, что оксидные расплавы содержат кремнекислородные анионы различной степени сложности, которые находятся в химическом равновесии между собой и «свободными» ионами кислорода.

Химическое равновесие в общем случае можно записать как



В дальнейшем это предположение легло в основу различных полимерных моделей силикатных расплавов. При этом в одних моделях (бесструктурных) струк-

тура анионов в явном виде не используется, в других же (структурных), напротив, основное внимание уделяется строению комплексных анионов.

«Пионерские» работы по этим направлениям были выполнены Г. Тупом и С. Самисом в 1962 г. [2], С. Массоном в 1965 г. [3], которые в рамках бесструктурной модели впервые дали количественную оценку распределения «свободных», концевых и мостиковых атомов кислорода в бинарных силикатных расплавах и записали константу равновесия реакции полимеризации (1) в виде:

$$K_{\Pi} = \frac{n_{\text{O}^{2-}} \cdot n_{\text{O}^0}}{n_{\text{O}^-}^2}, \quad (2)$$

где $n_{\text{O}^{2-}}$, n_{O^-} и n_{O^0} – количество молей O^{2-} , O^- и O^0 , приходящееся на моль бинарного силикатного расплава.

В работах [3–6] была предложена структурная модель. В ней предполагается, что кроме катионов Me^{n+} , «свободных» ионов кислорода O^{2-} и мономеров SiO_4^{4-} в бинарном силикатном расплаве существуют лишь цепочечные анионы типа $\text{Si}_i\text{O}_{3i+1}^{2(i+1)-}$. Они могут быть линейными и разветвленными. Кольцевые и сеточные структуры исключаются, т.е. рассматривается область составов бинарных силикатных расплавов $\text{MeO}-\text{SiO}_2$, лежащая в пределах $0 \leq x_{\text{SiO}_2} \leq 0,5$.

В работах [7; 8] рассмотрен подход С. Массона, И. Смита и С. Вайтвея на всем диапазоне составов [4–6]. Разработанный математический аппарат позволил получить хорошую сходимость расчетных и экспериментальных данных во всем изученном интервале составов.

В литературе имеется целый ряд работ, посвященных распространению полимерных моделей бинарных силикатных расплавов на многокомпонентные системы. Так, например, в работе [9] обобщены уравнения модели на тройные системы $\text{Me}'\text{O}-\text{Me}''\text{O}-\text{SiO}_2$, при этом принято допущение, что катионы Me'^{n+} и Me''^{n+} распределены беспорядочно, а степень полимеризации расплава является функцией констант полимеризации в бинарных силикатных расплавах.

Параллельно с развитием теоретических модельных представлений о структуре силикатных расплавов про-

водились экспериментальные исследования современными физико-химическими методами.

Применение аналитического метода триметилсилирования в комплексе с методом газовой [10] и бумажной [11] хроматографии, ультразвуковых исследований [12] свидетельствует о наличии в силикатных расплавах наряду со сложными кремнекислородными образованиями (SiO_2), являющимися предельной формой комплексных анионов $\text{Si}_i\text{O}_{3i+1-c}^{2(i+1-c)-}$ (число замыканий $c = 1$ для плоских колец), лишь простейших силикатных анионов: мономеров SiO_4^{4-} , коротких линейных цепочек $\text{Si}_2\text{O}_7^{6-}$ и $\text{Si}_3\text{O}_{10}^{8-}$, плоских колец.

Важно отметить, что ни в кристаллических, ни в стеклообразных, ни в жидких силикатах не обнаружено изомерных форм анионов, например, разветвленных цепочек.

Эти выводы, сделанные по результатам исследований, позволили разработать новый вариант полимерной модели, учитывающий переменную функциональность мономера [13], при допущении, что мономер SiO_4^{4-} является бифункциональным ($f = 2$) в цепных анионах, т.е. только два из четырех концевых атомов кислорода в кремнекислородном тетраэдре реакционно способны. В кольцевых ионах мономер SiO_4^{4-} тетрафункциональный ($f = 4$). Полимерная модель предполагает переменную среднюю функциональность мономера, которая изменяется от двух (в полностью деполимеризованном расплаве) до четырех (в чистом SiO_2). Повышение функциональности происходит постепенно по мере увеличения степени полимеризации. В результате были получены уравнения для количественного расчета структурных единиц, активности компонентов в бинар-

ных силикатных расплавах. Полученные уравнения были использованы для дальнейшего обоснования теории расчета активности в многокомпонентных оксидных расплавах, содержащих различные элементы-комплексобразователи.

В сталеплавильном производстве теория оксидных расплавов широко применяется при рассмотрении вопросов определения рафинировочных свойств шлаков, формирования шлакового гарнисажа и оксидных неметаллических включений (НВ).

В качестве примера можно представить результаты применения полимерной модели строения оксидных расплавов при анализе ряда характеристик шлаковых расплавов ковшевой обработки стали и образований оксидных НВ. Рассмотрим особенности влияния химического состава шлакового расплава (мас. %) на термодинамические активности компонентов, для чего в расплаве с постоянным содержанием оксидов магния и кремния (11,11 % MgO ; 16,67 % SiO_2) часть извести заменяется на глиноземистый флюс. Содержание оксида CaO изменяется от 33,33 до 55,56 %, а Al_2O_3 – от 16,76 до 38,89 %, т.е. происходит замещение CaO на Al_2O_3 .

В рамках использования полимерной модели можно рассчитать активности соединений CaO и MgO в расплаве, а также их активности насыщения (пределы насыщения) в зависимости от отношения $\text{CaO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ (рис. 1).

Такие данные по активностям оксидов CaO и MgO , например, важны для анализа рафинировочных свойств шлаков [14] и рассмотрения механизмов формирования кальций- и магнийсодержащих алюминатных НВ в стали [15].

При значительном увеличении концентрации CaO основные оксиды переходят в твердую фазу, т.е. с помощью полимерной модели можно определить границу перехода шлаков из гомогенного состояния в гетерогенное и формировать только гомогенные шлаки (рис. 1), обладающие максимальными десульфуризирующими свойствами и дополнительно способные поглощать НВ.

Если поведение оксидов CaO , MgO и SiO_2 понятно (т.е. они являются основными и кислотными), то соединение Al_2O_3 является амфотерным, которое может проявлять как основные, так и кислотные свойства. Так, было установлено, что при концентрации оксида Al_2O_3 до 16 % в оксидных расплавах, соответствующих составам шлаков, формируемых в агрегатах типа ковш–печь (АКП) и комплексах внепечной обработки стали, глинозем проявляет основные свойства, а при его содержании более 16 % уже начинает проявлять кислотные свойства [16].

Информация об активностях позволяет определять параметры шлаковых расплавов, обладающих максимально возможными свойствами по поглощению НВ. Показатели активности Al_2O_3 и SiO_2 , например, чрезвычайно важны для анализа способностей шлака к погло-

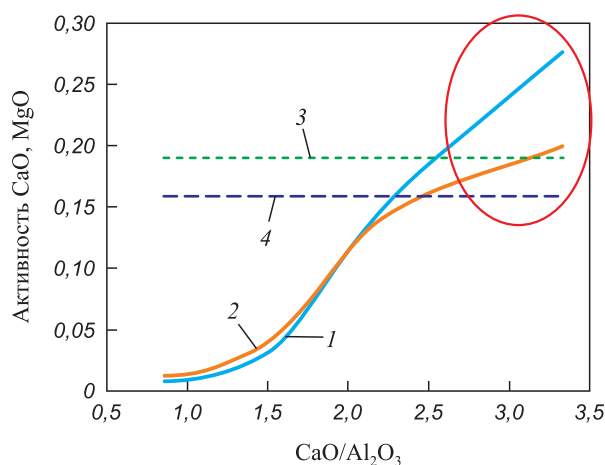


Рис. 1. Активности оксидов CaO и MgO в расплаве для шлакообразования, а также их активности насыщения в зависимости от отношения $\text{CaO}/\text{Al}_2\text{O}_3$:

1 – активность CaO ; 2 – активность MgO ;

3 – активность насыщения CaO ; 4 – активность насыщения MgO

Fig. 1. Activities of CaO and MgO oxides in the melt for slag formation and their saturation activities depending on $\text{CaO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ ratio:

1 – activity of CaO ; 2 – activity of MgO ;

3 – saturation activity of CaO ; 4 – saturation activity of MgO

щению и растворению алюминатных и силикатных НВ. Исходя из модели перехода НВ в шлак [17], можно сделать выводы, что важным этапом рафинирования стали является растворение НВ в шлаке. Для анализа этого процесса правомерен подход, традиционно использующийся для описания растворения огнеупорных частиц в шлаке [18]:

$$Q = \frac{D}{\Delta} S (C_{\text{нас}} - C), \quad (3)$$

где Q – скорость растворения твердого тела (огнеупора, НВ) в шлаке; D – коэффициент диффузии вещества твердого тела в шлаке; S – площадь контакта твердого тела и шлака; Δ – толщина диффузионного слоя; $C_{\text{нас}}$ – концентрация насыщения шлака материалом твердого тела; C – текущая концентрация материала твердого тела в шлаке.

Если в уравнении (3) величины D и Δ представить в виде их известных зависимостей от вязкости шлака, то можно определить показатели скорости растворения неметаллических включений

$$Q \sim \frac{C_{\text{нас}} - C}{\left(\frac{\eta}{\rho}\right)^{\frac{5}{6}}}. \quad (4)$$

Оксиды Al_2O_3 и SiO_2 – это наиболее крупные и мало-подвижные компоненты шлака, являющиеся основой физической массы силикатных и/или алюминатных НВ, поэтому характер течения и механизм диффузии и растворения компонентов, очевидно, будут контролировать именно данные компоненты. Насыщенность шлака материалом НВ необходимо определять по степени приближения шлака к насыщению SiO_2 и Al_2O_3 . На рис. 2 представлены соответствующие расчетные данные.

При сравнении расчетных данных можно сделать вывод, что способ формирования оксидного расплава будет оказывать определяющее влияние и на его характеристики. Данный вывод позволяет объяснить наблюдаемые на практике разночтения рекомендаций по формированию оптимального состава шлака и типу применяемых раскислителей с точки зрения получаемой чистоты стали [18; 19].

Возможными направлениями использования экспериментальных данных в исследованиях ионной теории шлаков могут быть: определение рациональных составов шлаков, обладающих рациональными параметрами, в том числе максимальной сульфидной емкостью, оптимальными свойствами к поглощению неметаллических включений; определение оптимальных составов шлака на различных этапах сталеплавления передела.

Как отдельное направление, развиваемое Уральской научной школой, можно выделить комплекс работ по исследованию характеристик металлических распла-

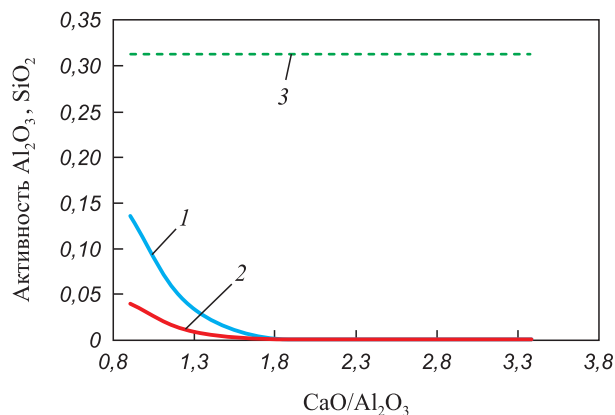


Рис. 2. Активности оксидов Al_2O_3 и SiO_2 в расплаве при шлакообразовании, активность насыщения Al_2O_3 (активность насыщения SiO_2 не отображена из-за высокого значения $\sim 0,99$) в зависимости от отношения $\text{CaO}/\text{Al}_2\text{O}_3$: 1 – активность Al_2O_3 ; 2 – активность SiO_2 ; 3 – активность насыщения Al_2O_3

Fig. 2. Activities of Al_2O_3 and SiO_2 oxides in the melt for slag formation and saturation activity of Al_2O_3 (saturation activity of SiO_2 was not detected due to a high value of $\sim 0,99$) depending on $\text{CaO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ ratio: 1 – activity of Al_2O_3 ; 2 – activity of SiO_2 ; 3 – saturation activity of Al_2O_3

вов, активное развитие которого началось в пятидесятых годах прошлого века в Уральском политехническом институте имени С.М. Кирова на кафедре физики под руководством Павла Владимировича Гельда [20; 21].

В соответствии с современными представлениями жидкое состояние вещества на температурной шкале занимает промежуточное положение между кристаллом и газом. Для металлургов, можно сказать, данная задача несколько облегчена, поскольку, как правило, рассматривается жидкое состояние металла в интервале от температуры плавления $T_{\text{пл}}$ до $1,25T_{\text{пл}}$. Очевидно, эта область близка к точке плавления и, соответственно, кристаллизации, и имеет второе название – расплав, при этом кристалл и жидкость – это конденсированные состояния, в которых определяющими являются силы притяжения атомов (в отличие от газа). По определяющим формулировкам в газовой фазе царит хаос, а в конденсированных – порядок, в кристаллах – дальний, а в расплаве – ближний.

Экспериментальные данные были подтверждены исследованиями фундаментальных свойств металлических расплавов (плотности, удельного электро-сопротивления) с применением дифференциального термического и рентгеновского анализов [21; 22]. Полученные данные позволяют утверждать, что уменьшение плотности при плавлении нормальных и переходных металлов составляет до 1–3 % за счет появления в структуре «дырок» и полостей. Рентгеновские исследования Е.З. Спектор и А.В. Романовой, а позднее и других авторов, показали, что при расплавлении кристалла наиболее вероятные ближайшие межатомные

расстояния не только не увеличиваются, но даже уменьшаются (в том числе и в железе). Это означает, что силы притяжения получают возможность как бы «стягивать» атомы расплава в кластеры или сиботаксисы и между кластерами распределяется свободный объем с отдельными атомами нагреваемого расплава.

Уточняя формулировки, можно отметить, что кластеры – это порождение конкретных, специфических для рассматриваемого типа атомов, сил притяжения, и поэтому кластер имеет характерную структуру, как и предшественник (кристалл). При этом силы меж-атомного взаимодействия и интенсивность теплового движения атомов возрастают на величину $K\Delta T$; где $K = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К; ΔT – прирост абсолютной температуры. Очевидно, что квазикристаллический порядок в кластере будет размыт тепловым движением, особенно на границах с полостями и с любыми проявлениями свободного объема, и выраженных границ не будет. Кластер будет плавно переходить в разупорядоченную зону, доля которой зависит от температуры и значима при температурах выше $1,5T_{пл}$.

Поэтому в дальнейшем переход от чистого металла к многокомпонентному расплаву усложняет картину его строения и различные проявления в кластере металлических, ковалентных, резонирующих или других специфических связей разной силы взаимодействия определяют его структуру и устойчивость во времени. Косвенные сведения об этих и других характеристиках удается получать методами физико-химического анализа, при изучении температурных и концентрационных зависимостей физических свойств расплавов.

К наиболее интересным данным следует отнести выводы, что расплав, даже совпадая по химическому составу с заданным, не всегда готов к выпуску. В произведенных из него профилях (например, таких как рельсы, трубы, детали машин) рано или поздно обнаружатся опасные дефекты, которые ведут к разрушению. Такая термодинамическая система очень далека от состояния равновесия и наследственное влияние фазовых составляющих шихты достаточно велико. В данном случае они передают расплаву все свои многочисленные типы ближнего порядка, т. е. расположения атомов, химическую и физическую микронеоднородности. Конвективное перемешивание и кипение, вызываемое всплывающими пузырьками оксида углерода или аргона, способны обеспечить лишь некоторое микровыравнивание. Самый доступный способ разрушить наследственные неравновесные атомные группировки – это нагрев расплава до критической температуры t_k , при которой средняя энергия теплового движения частицы становится соизмеримой с энергией активации ее отрыва от материнского ассоциата.

В соответствии с полученными данными термин «критическая температура» принято обозначать на температурной шкале особые точки, при которых происходит какой-либо переход системы в однофазное

равновесное состояние (предельная t_k равновесного сосуществования жидкости и пара; t_k взаимной неограниченной растворимости жидких смесей; t_k потери сверхпроводимости, сверхтекучести).

Считается, что t_k – это температура, при которой расплав в ходе нагрева переходит от наследственной неравновесности кластерного типа в состояние термодинамического равновесия. Если же расплав переходит из многофазного состояния (суспензия, эмульсия) в однофазное, то вместо t_k допустим и уместен термин «гомогенизация» расплава.

Надежный и удобный инструментальный способ фиксации t_k основан на вискозиметрии расплавов и заключается в обнаружении несовпадения значений вязкости при нагреве и охлаждении (рис. 3), причем несовпадение проявляется лишь при определенном перегреве над температурой ликвидуса [21]. Положение обратной (полученной при охлаждении) ветви вязкости будет определяться соотношением максимальной температуры нагрева исследуемого металлического образца во время опыта и значением температуры начала ветвления политерма. Если температура максимального нагрева не достигает температуры аномалии, то гистерезис (ветвление) не проявляется и происходит лишь при превышении температуры t_k .

Гистерезис свойств расплава – это проявление гистерезиса его структуры и именно поэтому результаты комплексных исследований свойств позволяют судить о структуре, а полученные результаты не зави-

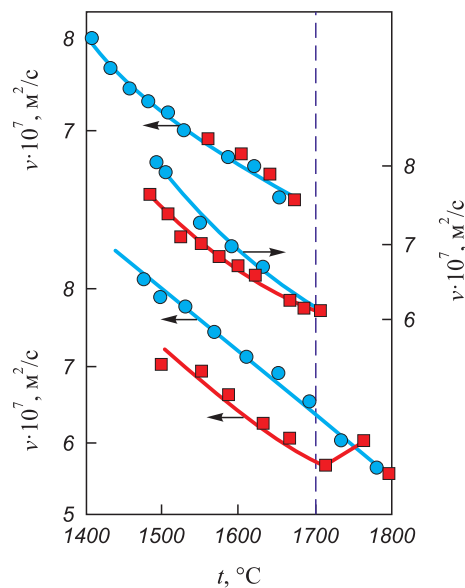


Рис. 3. Вязкость расплава Fe – 30 % Ni в зависимости от максимальной температуры нагрева его образца во время опыта: ● – во время нагрева; ■ – во время охлаждения; штриховая линия – температура t_k

Fig. 3. Viscosity of Fe – 30 % Ni melt depending on the maximum heating temperature of its sample during the experiment: ● – during heating; ■ – during cooling; dashed line – temperature t_k

сят от исследуемого объема, так как определяются процессами, которые протекают в кинетическом режиме на микроуровне. Величина t_k зависит от марки стали, фазового состава шихты и условий выплавки, а нагрев до t_k – способ перевода системы в равновесие. При этом избыточный перегрев расплава выше t_k чисто технологически может оказаться опаснее недогрева и тогда резко возрастет газонасыщенность металла, усиливает его взаимодействие с футеровкой и т. д.

Таким образом, неравновесные расплавы временно сохраняют в себе элементы структуры исходных фаз. Строение и свойства равновесных, а значит, максимально однородных систем определяются не предысторией, а химическим составом и температурой. Разливка равновесного расплава обеспечивает стабильный от плавки к плавке ход процесса кристаллизации, оптимальную структуру слитков и отливок, стабильно высокий уровень качества [21].

Благодаря фундаментальным исследованиям свойств и строения металлических жидкостей возникло новое прикладное направление: технологии перевода многокомпонентных металлических расплавов в состояние равновесия с целью повышения и стабилизации качества продукции под общепринятым названием «термовременная обработка» [21].

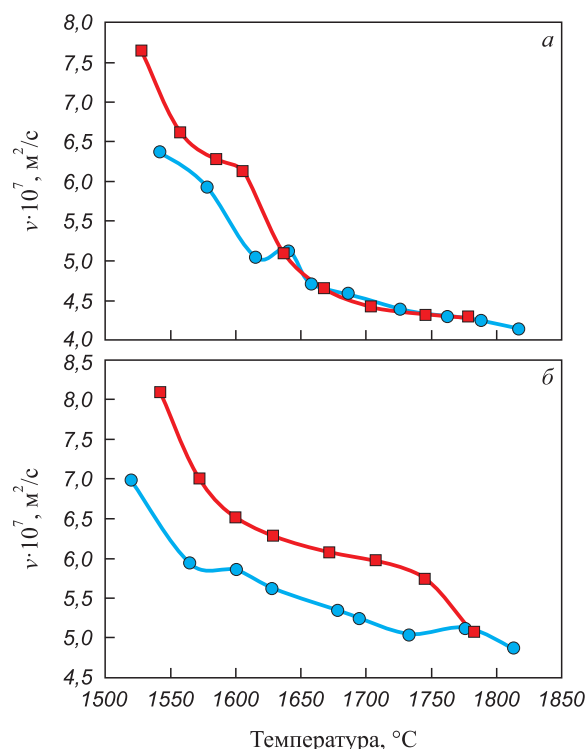


Рис. 4. Политермы кинематической вязкости расплава стали марки 20тр:
а – с обработкой SK15A7; б – без обработки;
● – нагрев; ■ – охлаждение

Fig. 4. Polytherms of kinematic viscosity of the melt of 20tr steel:
а – with SK15A7 treatment; б – without treatment;
● – heating; ■ – cooling

Дальнейшее развитие исследований в этом направлении показало возможность совершенствования классической термовременной обработки. Установлена возможность существенного снижения необходимого перегрева и ускорения процесса формирования микрогетерогенного расплава за счет модифицирования. Например, установлено, что ввод оптимального количества кальцийсодержащего модификатора в сталь будет приводить к снижению t_k с 1780 – 1800 до 1630 – 1640 °С, т. е. до технологически достижимых значений (рис. 4).

Установленные факты имеют большое производственное значение и позволяют разрабатывать технологические решения по управлению свойствами стали в жидком и твердом состояниях.

Выводы

На основе работ Уральской научной школы и собственных исследований предпринята попытка проанализировать историческое развитие научных представлений о строении оксидов и растворимого железа, рассмотреть возникновение методов, основанных на полимерной (ионной) теории растворения оксидов и теории жидкометаллических кластеров. Показаны возможности использования полимерной модели для определения границы перехода шлака из гомогенного состояния в гетерогенное и условий образования однородного шлака с высокими рафинировочными свойствами. В ходе исследований установлено, что при идеальных условиях оксид Al_2O_3 может проявлять как основные, так и кислотные свойства: при его содержании в оксидном расплаве 16 % глинозем проявляет основные свойства, когда его содержание превышает 16 %, он начинает проявлять кислые свойства.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ / REFERENCES

1. Есин О.А. Электролитическая природа жидких шлаков. Свердловск: Уральский индустриальный институт; 1946:41.
2. Toop G.V., Samis C.S. Activities of ions in silicate melts. *Transactions of Metallurgical Society AIME*. 1962;224(5): 878–887.
3. Masson C.R. An approach to the problem of ionic distribution in liquid silicates. *Proceedings of the Royal Society A*. 1965;287(1409):201–221. <https://doi.org/10.1098/rspa.1965.0176>
4. Whiteway S.G., Smith I.B., Masson C.R. Theory of molecular size distribution in multichain polymers. *Canadian Journal of Chemistry*. 1970;48(1):33–45. <https://doi.org/10.1139/v70-006>
5. Masson C.R., Smith I.B., Whiteway S.G. Molecular size distribution in multichain polymers: application of polymer theory to silicate melts. *Canadian Journal of Chemistry*. 1970;48(1):201–202. <https://doi.org/10.1139/v70-033>
6. Masson C.R., Smith I.B., Whiteway S.G. Activities and ionic distribution in liquid silicates: application of polymer theory.

- Canadian Journal of Chemistry*. 1970;48(9):1456–1464.
<https://doi.org/10.1139/v70-238>
7. Есин О.А. Применение теории полимеров к расплавленным шлакам. В кн.: *Физико-химические исследования металлургических процессов: Межвуз. сб.* Свердловск: УПИ; 1973;1:5–17.
 8. Есин О.А. О применении полимерной модели, учитывающей изомерные формы, к расплавленным силикатам. В кн.: *Физико-химические исследования металлургических процессов: Межвуз. сб.* Свердловск: УПИ; 1976;4:17–27.
 9. Yokokawa T., Niwa K. Free energy and basicity of molten silicate solution. *Transactions of the Japan Institute of Metals*. 1969;10(2):81–84.
<https://doi.org/10.2320/matertrans1960.10.81>
 10. Smart R.M., Glasser F.P. Silicate anion constitution of lead silicate glasses and crystals. *Physics and Chemistry of Glasses*. 1978;19(5):95–102.
 11. Wieker W., Hoebbel D., Götz J. Die Anionenverteilung in Silikatgläsern und ihre Bedeutung für die Glasbildung. *Wissenschaftliche Zeitschrift Friedrich-Schiller-Univ.* 1979;28(2-3):277–285. (In Germ.)
 12. Байдов В.В. Ультразвуковые исследования и микроструктура силикатных расплавов. В кн.: *Свойства и структура шлаковых расплавов*. Москва: Наука; 1970:23–38.
 13. Новиков В.К., Невидимов В.Н. Полимерная природа расплавленных шлаков. Екатеринбург: УГТУ-УПИ; 2006:62.
 14. Шешуков О.Ю., Некрасов И.В., Метелкин А.А., Лозовая Е.Ю., Шевченко О.И., Савельев М.В. Современная сталь: теория и технология. Екатеринбург: Изд-во УрФУ; 2020:400.
 15. Хорошилов А.Д. Анализ и разработка технологии ковшевой обработки сверхнизкоуглеродистых сталей с целью повышения качества поверхности автолистостого проката: автореф. дисс. канд. техн. наук. Москва; 2022:19.
 16. Шешуков О.Ю., Михеенков М.А., Некрасов И.В., Егiazарьян Д.К., Метелкин А.А., Шевченко О.И. Вопросы утилизации рафинировочных шлаков сталеплавильного производства. Нижний Тагил: НТИ (филиал) УрФУ; 2017:208.
 17. Дерябин В.А., Дерябин А.А. Термодинамические особенности перехода твердых неметаллических включений из металла в шлак. *Известия вузов. Черная металлургия*. 1990;33(10):8–9.
Deryabin V.A., Deryabin A.A. Thermodynamic features of transition of solid nonmetallic inclusions from metal to slag. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 1990;33(10):8–9. (In Russ.).
 18. Некрасов И.В., Шешуков О.Ю., Невидимов В.Н. и др. Оценка агрессивности шлака к неметаллическим включениям. В кн.: *Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов. Труды XIII российской конференции*. Екатеринбург: Изд-во УрО РАН; 2011:16–19.
 19. Шешуков О.Ю., Некрасов И.В., Михеенков М.А., Егiazарьян Д.К., Ермакова В.П., Смирнова В.Г., Чашин А.А., Калимуллин Э.В. Шлаковый режим У КП и эффективность модифицирования. *Черная металлургия. Бюллетень научно-технической и экономической информации*. 2015;(9(1389)):38–43.
Sheshukov O.Yu., Nekrasov I.V., Mikheenkova M.A., Egiazar'yan D.K., Ermakova V.P., Smirnova V.G., Chashchin A.A., Kalimullin E.V. Slag mode of a ladle furnace unit and modification efficiency. *Ferrous Metallurgy. Bulletin of Scientific, Technical and Economic Information*. 2015;(9(1389)):38–43. (In Russ.).
 20. Шешуков О.Ю., Некрасов И.В., Бонарь С.Н., Егiazарьян Д.К., Цымбалист М.М., Сивцов А.В. Сульфидная емкость глиноземистых шлаков внепечной обработки стали и активность анионов кислорода. *Черная металлургия. Бюллетень научно-технической и экономической информации*. 2017;(2(1406)):30–33.
Sheshukov O.Yu., Nekrasov I.V., Bonar' S.N., Egiazar'yan D.K., Tsymbalist M.M., Sivtsov A.V. Sulfide capacity of alumina slags of ladle-furnace steel treatment and activity of oxygen anions. *Ferrous Metallurgy. Bulletin of Scientific, Technical and Economic Information*. 2017;(2(1406)):30–33. (In Russ.).
 21. Гельд П.В., Баум Б.А., Петрушевский М.С. Расплавы ферросплавного производства – жидкие сплавы переходных металлов с кремнием и углеродом. Москва: Металлургия; 1973:288.
 22. Баум Б.А., Хасин Г.А., Тягунов Г.В. и др. Жидкая сталь. Москва: Металлургия; 1984:208.
 23. Пат. RU 2535428 С1. Способ внепечной обработки стали кальцием / О.Ю. Шешуков, И.В. Некрасов, В.П. Ермакова, Л.А. Маршук, Д.К. Егiazарьян, М.В. Лапин, А.Н. Шаманов, А.В. Коврижных, А.О. Акчибаш, Д.П. Шведов, А.С. Токарев; заявл. 10.04.2013; опубл. 10.12.2014.
 24. Некрасов И.В., Шешуков О.Ю., Цепелев В.С. Структура расплавов железа и перспективные технологии. В кн.: *Сборник трудов Междоународной научной конференции «Физико-химические основы металлургических процессов» имени академика А.М. Самарина*. Выкса: АО «Выксунский металлургический завод»; 2022:131–135.
 25. Шешуков О.Ю., Некрасов И.В., Конашков В.В., Егiazарьян Д.К. Структурно-чувствительные свойства расплава стали: оценка эффективности ее обработки модификаторами и рафинирующими шлаками. *Электрометаллургия*. 2019;(2):2–12.
Sheshukov O.Yu., Nekrasov I.V., Konashkov V.V., Egiazar'yan D.K. Structure-sensitive properties of steel melt: Efficiency evaluation of steel treatment with modifiers and refining clinkers. *Elektrometallurgiya*. 2019;(2):2–12. (In Russ.).

Сведения об авторах

Information about the Authors

Олег Юрьевич Шешуков, д.т.н., профессор, директор Института новых материалов и технологий, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, главный научный сотрудник, Институт металлургии УрО РАН
ORCID: 0000-0002-2452-826X
E-mail: o.j.sheshukov@urfu.ru

Oleg Yu. Sheshukov, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Director of the Institute of New Materials and Technologies, Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Chief Researcher, Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences
ORCID: 0000-0002-2452-826X
E-mail: o.j.sheshukov@urfu.ru

Владимир Николаевич Невидимов, к.т.н., доцент кафедры теории металлургических процессов Института новых материалов и технологий, Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: v.n.nevidimov@urfu.ru

Илья Владимирович Некрасов, к.т.н., доцент кафедры металлургии железа и сплавов Института новых материалов и технологий, Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: ivn84@bk.ru

Анатолий Алексеевич Метелкин, д.т.н., доцент кафедры металлургии железа и сплавов, института новых материалов и технологий, Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина
E-mail: anatoliy82@list.ru

Владимир Степанович Цепелев, д.т.н., доцент, профессор кафедры безопасности жизнедеятельности в техносфере, директор Исследовательского центра физики металлических жидкостей, Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина
ORCID: 0000-0003-4195-9042
E-mail: v.s.tsepelev@urfu.ru

Vladimir N. Nevidimov, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Prof. of the Chair of Theory of Metallurgical Processes of the Institute of New Materials and Technologies, Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin
E-mail: v.n.nevidimov@urfu.ru

Ilya V. Nekrasov, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Prof. of the Chair of Metallurgy of Iron and Alloys of the Institute of New Materials and Technologies, Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin
E-mail: ivn84@bk.ru

Anatolii A. Metelkin, Dr. Sci. (Eng.), Assist. Prof. of the Chair of Metallurgy of Iron and Alloys of the Institute of New Materials and Technologies, Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin
E-mail: anatoliy82@list.ru

Vladimir S. Tsepelev, Dr. Sci. (Eng.), Assist. Prof., Prof. of the Chair of Life Safety in the Technosphere, Director of the Research Center for Physics of Metallic Liquids, Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin
ORCID: 0000-0003-4195-9042
E-mail: v.s.tsepelev@urfu.ru

Вклад авторов

Contribution of the Authors

О. Ю. Шешуков – постановка задачи исследований, корректировка и редактирование статьи.

В. Н. Невидимов – проведение лабораторных опытов, написание статьи.

И. В. Некрасов – постановка задачи исследований, проведение лабораторных опытов, написание статьи.

А. А. Метелкин – обсуждение полученных результатов, редактирование статьи.

В. С. Цепелев – постановка задачи исследований, корректировка и редактирование статьи.

O. Yu. Sheshukov – setting the research task, correcting and editing the article.

V. N. Nevidimov – conducting laboratory experiments, writing the article.

I. V. Nekrasov – setting the research task, conducting laboratory experiments, writing the article.

A. A. Metelkin – discussion of the results, editing the article.

V. S. Tsepelev – setting the research task, correcting and editing the article.

Поступила в редакцию 18.03.2024

После доработки 20.09.2024

Принята к публикации 25.12.2024

Received 18.03.2024

Revised 20.09.2024

Accepted 25.12.2024