

А. В. Харченко /к. т. н./

Запорожская государственная инженерная академия (ЗГИА), г. Запорожье, Украина
e-mail: odds@i.ua

Р. В. Синяков /к. т. н./

Технологическая компания «Мин Цинь»,
г. Пекин, КНР
e-mail: rvsr@mail.ru

Термодинамика неметаллических включений в стали

A. V. Kharchenko /Cand. Sci. (Tech.)/

Zaporizhzhya State Engineering Academy,
Ukraine, Zaporizhzhya,
e-mail: odds@i.ua

R. V. Sinyakov /Cand. Sci. (Tech.)/

«Ming Xing» Technology Company, Beijing, PRC
e-mail: rvsr@mail.ru

Thermodynamics of non-metallic inclusions in steel

Цель. Получение термодинамических соотношений, описывающих зарождение и рост неметаллических включений в стали.

Методика. Термодинамические соотношения получены на основе метода химических потенциалов Гиббса с использованием поправки Томсона-Гиббса.

Результаты. Разработана термодинамическая модель неметаллических включений; определены закономерности изменения массы и химического состава неметаллических включений в жидкой стали при ее охлаждении; приведены способы определения критического размера неметаллических включений в стали.

Научная новизна. Показана возможность образования гетерогенных включений с тугоплавким ядром, насыщенным оксидами щелочноземельных металлов, и легкоплавкой гомогенной оболочкой.

Практическая значимость. Предложенные термодинамические соотношения и модель неметаллических включений могут быть использованы для анализа процессов образования и удаления неметаллических включений с целью обеспечения чистоты стали и оптимизации химического состава включений. (Ил. 6. Библиогр.: 7 назв.)

Ключевые слова: сталь, неметаллические включения, термодинамика, поверхностная энергия, химический потенциал, критический размер зародыша.

Введение. Одной из нерешенных проблем теории металлургических процессов остается надежный расчет массы, размеров и состава неметаллических включений (НВ) в стали. Существует большой массив экспериментальных данных по этой тематике, однако имеющиеся теоретические разработки могут претендовать лишь на решение отдельных аспектов проблемы для немногих классов неметаллических включений. Обширный экспериментальный материал по наиболее значимым для металлургии сталей системам неметаллических включений, включая часто встречающиеся FeO-MnO-SiO₂-Al₂O₃, приведен в работах Кислинга [1; 2].

Постановка задачи. В работе ставится задача дать термодинамическое описание неметаллических включений в стали, которое позволит по составу металла количественно оценивать их массу, размер и химический состав. На первом этапе вводится упрощение, согласно которо-

му все эндогенные жидкие включения имеют сферическую форму. Неметаллическая фаза, составляющая неметаллические включения, может иметь различное агрегатное состояние и химический состав, однако предполагается существование наиболее вероятного химического состава этой фазы, отвечающего термодинамическому равновесию в системе «металл – НВ». В тексте статьи индексы величин, относящихся к неметаллическим включениям, заключены в brackets < >.

Основная часть исследований. Кривизна поверхности неметаллического включения требует введения в выражение для химического потенциала каждого компонента в неметаллической фазе слагаемого λ , зависящего от молярного объема, радиуса включения и его удельной поверхностной энергии, именуемого обычно поправкой Томсона-Гиббса [3]:

$$\lambda = \frac{2\sigma}{r} v^M, \quad (1)$$

где σ – удельная поверхностная энергия (поверхностное натяжение); r – радиус включения; v^M – молярный объем.

При этом величина молярного объема для разных компонентов раствора, каковым является неметаллическое включение, существенно различается. Более того, учитывая, что в первом приближении химический состав оболочки неметаллического включения идентичен его объемному составу, величину λ следует индексировать, считая ее индивидуальной для каждого i -го компонента раствора:

$$\lambda_i = \frac{2\sigma}{r} v_i^M = \frac{2\sigma M_i}{r\rho}, \quad (2)$$

где v_i^M – молярный объем i -го компонента (химического элемента); M_i – молярная масса i -го компонента; ρ – плотность включения (при отсутствии точных данных, обычно принимаемая равной 3000 кг/м³).

Поверхностное натяжение σ неметаллического включения произвольного состава является неизвестной величиной, но в литературе имеются данные об этих величинах для ряда жидких химических соединений – оксидов, солей и сульфидов [3; 4], из которых с помощью регрессионного анализа можно получить вклад каждого компонента $\sigma_{<i>}$. Тогда величина σ принимает следующий вид:

$$\sigma = \sum_{j=1}^k x_{<j>} \sigma_{<j>}, \quad (3)$$

где $x_{<j>}$ – мольная доля j -го компонента; k – число компонентов (химических элементов), составляющих неметаллическую фазу.

Таким образом, химический потенциал i -го компонента неметаллического включения составит:

$$\begin{aligned} \mu_{<i>} &= \mu_{<i>}^0 + RT \ln a_{<i>} + \lambda_i = \\ &= \mu_{<i>}^0 + RT \ln x_{<i>} \gamma_{<i>} + \lambda_i, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\mu_{<i>}^0$ – химический потенциал чистого компонента i в стандартном состоянии; $a_{<i>}$ – активность i -го компонента в неметаллических включениях; $\gamma_{<i>}$ – коэффициент активности i -го компонента.

В полученном выражении коэффициенты активности компонентов целесообразно вычислять в соответствии с термодинамической моделью многокомпонентной жидкой шлаковой фазы, учитывающей валентность химических элементов [5]:

$$\begin{aligned} \ln \gamma_{<i>} &= \ln \gamma'_{<i>} + \mu_{<e>} v_i = v_i \ln \Psi_{<i>} + \\ &+ \sum_{j=1}^k x_{<j>} v_j (1 - \Psi_{<j>} \beta_{<j>}) + \mu_{<e>} v_i, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\gamma'_{<i>}$ – коэффициент активности i -го компонента без учета электрохимического слагаемого; $\mu_{<e>}$ – химический потенциал электронов (уровень Ферми); v_i – валентность i -го элемента;

$\Psi_{<i>} = \left(\sum_{j=1}^k x_{<j>} \beta_{<j>} \right)^{-1}$; $\beta_{<ij>} = \exp\left(-\frac{\epsilon_{<ij>}}{RT}\right)$; R – универсальная газовая постоянная; T – абсолютная температура; $\epsilon_{<ij>}$ – парные энергетические параметры взаимодействия.

В термодинамическом описании системы металл-шлак [6] фигурируют не абсолютные значения химических потенциалов, а их разности между контактирующими фазами, что позволяет заменить стандартные химические потенциалы в металле и шлаке соответствующей константой равновесия, определяемой экспериментально как линейная функция обратной температуры. Аналогично формулируется выражение для разности химических потенциалов элементов в металле и неметаллических включениях:

$$\begin{aligned} \Delta\mu_{[i]} &= RT \ln K_{[i]} + RT \ln a_{[i]} - RT \ln a_{<i>} - \lambda_i = \\ &= RT \ln(K_{[i]} a_{[i]} / a_{<i>}) - \lambda_i, \end{aligned} \quad (6)$$

где $\ln K_{[i]} = (\mu_{[i]}^0 - \mu_{<i>}^0) / RT$ – логарифм константы равновесия в системе «металл – НВ»; $a_{[i]}$, $a_{<i>}$ – активности i -го компонента в металле и неметаллических включениях.

Важно отметить, что константы равновесия в системе «металл – НВ» совпадают с константами равновесия «металл – шлак», так как неметаллическая фаза, составляющая неметаллические включения, взаимодействует с металлом по тем же законам физической химии, что и шлак. Однако, в отличие от шлака, жидкие неметаллические включения приходят в состояние термодинамического равновесия с металлом практически мгновенно, и для них необходимо учитывать поверхностные эффекты.

Условием термодинамического равновесия в системе «металл-НВ» является равенство химических потенциалов компонентов (химических элементов) в металле и неметаллических включениях. Кроме того, должна быть обеспечена электронейтральность неметаллической фазы. Эти условия формулируются в виде системы $k+1$ уравнений:

$$\begin{cases} \Delta\mu_{[i]} = 0, \quad i = 1..k; \\ \sum_{i=1}^k x_{<i>} v_i = 0, \end{cases} \quad (7)$$

которая, как показано в работе [6], может быть преобразована к эквивалентной системе двух нелинейных уравнений относительно двух неизвестных $\mu_{<e>}$ и L :

$$\begin{cases} F_1 = \sum_{i=1}^k \frac{n_i v_i}{1 + \exp(-A_{<i>} + L + \lambda_i / RT + \mu_{<e>} v_i)} = 0; \\ F_2 = \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{1 + \exp(-A_{<i>} + L + \lambda_i / RT + \mu_{<e>} v_i)} - \frac{N}{1 + \exp(L)} = 0, \end{cases} \quad (8)$$

где $A_{<i>} = \ln(K_{[i]} \gamma_{[i]} / \gamma'_{<i>})$ – консолидированная константа равновесия по i -му компоненту, включающая собственно константу равновесия в системе «металл – НВ» и коэффициенты активности в металле и неметаллических включениях; $L = \ln(N_m / N_n)$ – логарифм мольной кратности неметаллических включений; N_m и N_n – число молей в металле и неметаллических включениях, $N = N_m + N_n$; n_i – общее число молей i -го компонента в системе «металл – НВ».

В результате решения системы уравнений (8) находим неизвестные величины $\mu_{<e>}$ и L и равновесные числа молей в неметаллических включениях и металле с помощью следующих выражений:

$$n_{<i>} = \frac{n_i}{1 + \exp(-A_{<i>} + L + \lambda_i / RT + \mu_{<e>} v_i)}; \quad (9)$$

$$n_{[i]} = n_i - n_{<i>}, \quad i = 1..k.$$

Для решения системы уравнений (8) не имеет принципиального значения, в каком исходном состоянии находится система «металл – НВ», в частности числа молей n_i в системе могут совпадать с числами молей в металле $n_{[i]}$ при первоначальном отсутствии неметаллической фазы. В этом случае эндогенные неметаллические включения зарождаются при охлаждении системы вплоть до температуры кристаллизации металла.

При охлаждении системы константы равновесия элементов с положительной валентностью увеличиваются, что приводит к появлению неметаллической фазы. Однако, в отличие от шлаковой фазы, зарождение неметаллических включений зависит также от их радиуса и соответствующих величин λ_i . При очень малом радиусе величины λ_i будут велики, и снижение температуры не приведет к появлению включений. Таким образом, для каждой температуры существует определенный критический радиус, который служит нижним пределом для реально зарождающихся неметаллических включений. Чем больше сдвиг температуры при охлаждении системы, тем более мелкие включения могут быть термодинамически устойчивыми. Поскольку зарождение эндогенных неметаллических включений имеет флуктуационную

природу, фактически будут появляться включения различного радиуса, однако только те из них будут иметь тенденцию к росту, которые имеют радиус больше критического. Остальные включения будут растворяться.

Из анализа системы уравнений (8) следует, что условием сосуществования в системе металлической и неметаллической фаз при определенной температуре является неразрешимость характеристического уравнения $H = 0$ относительно $\mu_{<e>}$ при некотором заданном радиусе включений:

$$H = \sum_{i=1}^k n_i [1 - \exp(A_{<i>} - \lambda_i / RT - \mu_{<e>} v_i)] = 0. \quad (10)$$

Как показано на схематическом рис. 1, при наличии у этого уравнения двух рациональных корней система состоит только из одного металла. При наличии одного корня (кривая H – касательная к оси абсцисс) система переходит в состояние сосуществования металлической и неметаллической фаз. При отсутствии рациональных корней (кривая H ниже оси абсцисс) в системе имеются неметаллические включения в равновесии с металлом. Чем больше радиус включений, тем больше масса неметаллической фазы и тем меньше величины λ_i .

При отсутствии решения уравнения (10) можно подобрать такие значения λ_i , при которых решение появляется, а неметаллическая фаза исчезает. Эти значения соответствуют критическому радиусу неметаллических включений r_c .

В структуре выражения для λ_i (2) удобно выделить величину, постоянную для всех компонентов:

$$\Lambda = \frac{\lambda_i}{RTM_i} = \frac{2\sigma}{r_p RT}, \quad (11)$$

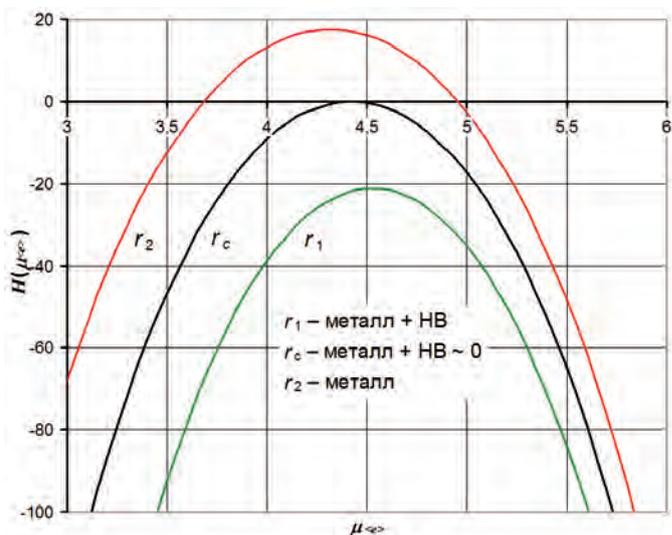


Рис. 1. Фазовый состав системы «металл – НВ» при различных радиусах неметаллических включений ($r_1 > r_c > r_2$)

так что

$$\lambda_i / RT = \Lambda M_i, \quad i = 1..k. \quad (12)$$

Таким образом, для определения критического радиуса неметаллических включений r_c необходимо найти решение системы уравнений $H = 0$ и $\partial H / \partial \mu_{<e>} = 0$ относительно Λ и $\mu_{<e>}$:

$$\begin{cases} H = \sum_{i=1}^k n_i [1 - \exp(A_{< i >} - \Lambda M_i - \mu_{< e >} v_i)] = 0; \\ \partial H / \partial \mu_{< e >} = \sum_{i=1}^k n_i v_i \exp(A_{< i >} - \Lambda M_i - \mu_{< e >} v_i) = 0, \end{cases} \quad (13)$$

в которой второе уравнение определяет координату максимума кривой $H(\mu_{<e>})$. Решение данной системы соответствует кривой на рис. 1, касательной к оси абсцисс. Найденное критическое значение Λ_c позволяет вычислить критический радиус неметаллических включений из уравнения (11):

$$r_c = \frac{2\sigma}{\Lambda_c \rho RT}. \quad (14)$$

Известен также другой способ определения критического радиуса неметаллических включений, основанный на том, что существует максимум энергии Гиббса зародыша в зависимости от его радиуса [7].

Изменение энергии Гиббса при образовании зародыша одного неметаллического включения можно представить в виде двух слагаемых, отвечающих изменению его объемной и поверхностной энергии:

$$\begin{aligned} \Delta G_1 &= - \sum_{i=1}^k n_{< i >} \Delta \mu'_{i>} + 4\pi r^2 \sigma = \\ &= -N_1 \sum_{i=1}^k x_{< i >} \Delta \mu'_{i>} + 4\pi r^2 \sigma \end{aligned} \quad (15)$$

где $n_{< i >}$ - число молей i -го компонента; $\Delta \mu'_{i>} = RT \ln(K_{[i> a_{[i]}] / a_{< i >}})$ - изменение химического потенциала i -го компонента при его переходе из неметаллического включения в металл (без поправки Томсона-Гиббса); N_1 - число молей в одном включении, которое определяется как отношение объема включения V_1 к молярному объему v^M :

$$N_1 = \frac{V_1}{v^M} = \frac{4\pi r^3}{3} \cdot \frac{\rho}{\sum_{i=1}^k x_{< i >} M_i}. \quad (16)$$

Подстановка (16) в (15) позволяет выразить изменение энергии Гиббса при зарождении неметаллического включения как функцию его радиуса r :

$$\Delta G_1 = - \frac{4\pi r^3}{3} \cdot \frac{\rho \sum_{i=1}^k x_{< i >} \Delta \mu'_{i>}}{\sum_{i=1}^k x_{< i >} M_i} + 4\pi r^2 \sigma. \quad (17)$$

Если химические потенциалы элементов в неметаллическом включении меньше, чем в металле ($\Delta \mu'_{i>} > 0$), создается движущая сила перехода элементов из металла во включение, и возможен его рост. В этом случае функция $\Delta G_1(r)$, вычисляемая по формуле (17), имеет вид (рис. 2):

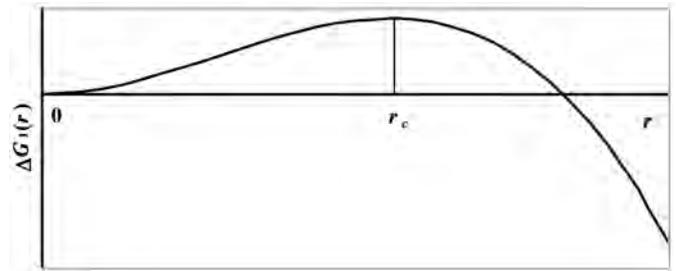


Рис. 2. Изменение энергии Гиббса как функция радиуса зародыша неметаллического включения

Максимум функции $\Delta G_1(r)$ соответствует зародышу критического размера. Если в результате флуктуации образовался зародыш меньше критического, то для последующего его самопроизвольного роста необходимо увеличение энергии Гиббса, что невозможно в силу второго начала термодинамики. Зародыши, имеющие размер больше критического, имеют устойчивую тенденцию к росту.

Приравнявая первую производную ΔG_1 по r к нулю, находим критический радиус:

$$r_c = \frac{2\sigma}{\rho} \cdot \frac{\sum_{i=1}^k x_{< i >} M_i}{\sum_{i=1}^k x_{< i >} \Delta \mu'_{i>}}. \quad (18)$$

На рис. 3 приведен результат расчета критического радиуса неметаллических включений в жидкой стали 12ГС двумя способами согласно (13, 14) и (18) в температурном интервале 1500...1620 °С.

Как видно, обратная величина критического радиуса неметаллических включений уменьшается с увеличением температуры металла. При этом с высокой точностью наблюдается почти линейная зависимость $1/r_c(t)$. При приближении к начальной температуре 1625 °С критический радиус стремится к бесконечности, так как при этой температуре до охлаждения металл находился в состоянии термодинамического равновесия со шлаковой и газовой фазами, ко-

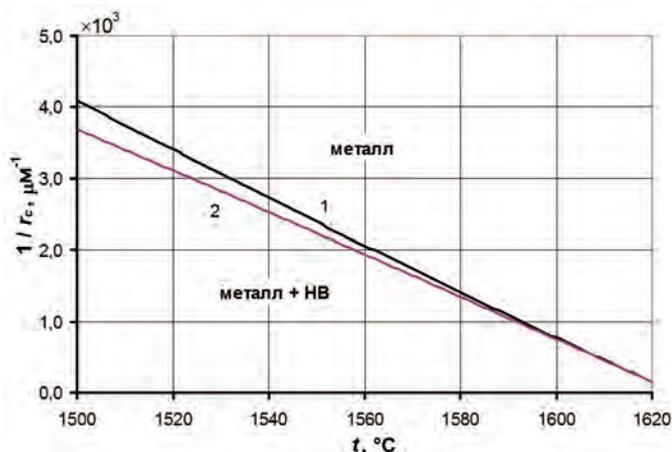


Рис. 3. Зависимость критического радиуса неметаллических включений в жидкой стали 12ГС от температуры при охлаждении от 1625 °С: 1 – расчет по формулам (13, 14), 2 – расчет по формуле (18)

торые по определению имеют нулевую кривизну межфазной поверхности с металлом.

Расчет критического радиуса включения по формуле (18) дает результат того же порядка, что и (13, 14), однако менее точен, так как требует предположений о химическом составе неметаллической фазы, который заранее не известен. Кроме того, недостаток данного подхода заключается в том, что он основан на локальном квазиравновесии в подсистеме «металл – включение», которое не учитывает изменения состояния системы «металл – НВ» в целом.

Следует иметь в виду, что при больших переохлаждениях ($t \sim 1500$ °С) критический размер включений становится настолько малым, что для образования зародыша, способного к росту, достаточно агрегирования нескольких положительно и отрицательно заряженных ионов, на-

пример, кальция, кремния и кислорода. Разумеется, для столь малых образований необходимо с осторожностью использовать термодинамические соотношения, так как в их основе лежит статистика. Отчасти данный микромасштабный эффект компенсируется увеличением поверхностного натяжения на границе «металл – НВ» при понижении температуры расплава.

На рис. 4 показано изменение относительной массы и химического состава неметаллических включений в жидкой стали 12ГС при их росте от критического размера. В целом в составе включений преобладает диоксид кремния. В порядке убывания за ним идут оксиды марганца, алюминия, магния и кальция. Содержание последнего является существенным только вблизи критического размера. Заметным является локальный максимум содержания оксида магния, который имеет ограниченную растворимость в системах с оксидами марганца, кремния и алюминия. Поэтому следует ожидать выпадения мелкодисперсной фазы MgO в объеме самих включений, что часто наблюдается на практике.

Поскольку неметаллическая фаза, насыщенная CaO и MgO в начальный период роста включения, имеет высокую температуру плавления, возможно образование тугоплавкого ядра и последующий послойный рост с градиентным изменением химического состава от центра до поверхности твердой фазы. Если неметаллическая фаза при каком-то отношении r/r_c становится жидкой из-за уменьшения содержания CaO и MgO, ее химический состав в дальнейшем изменяется синхронно с увеличением радиуса, так как равновесие с металлом в жидких неметаллических включениях малого размера (< 1 мкм) достигается почти мгновенно. Таким образом

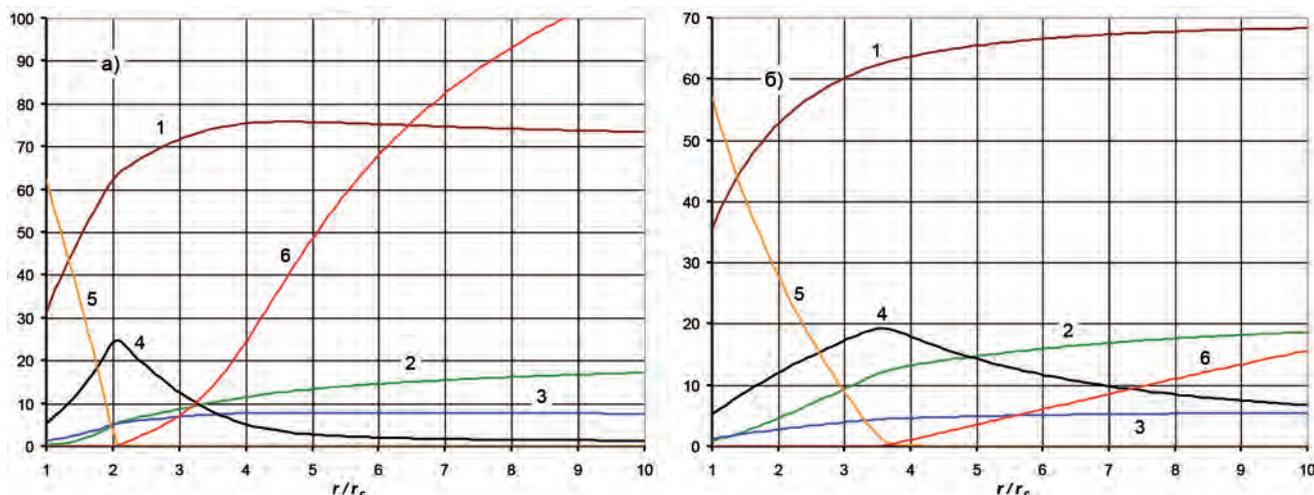


Рис. 4. Изменение химического состава (%) и относительной массы (г/т) эндогенных неметаллических включений в жидкой стали 12ГС при их росте от критического размера:

1 – SiO₂, 2 – MnO, 3 – Al₂O₃, 4 – MgO, 5 – CaO, 6 – отн. масса. Охлаждение металла от 1625 до 1500 °С (а) и до 1550 °С (б)

СТАЛЕПЛАВИЛЬНОЕ ПРОИЗВОДСТВО

формируются включения со сложной морфологией – тугоплавким ядром и легкоплавкой (или менее тугоплавкой) гомогенной оболочкой.

Из-за высокого содержания диоксида кремния и оксида кальция в начале роста неметаллического включения возможно образование комплексного соединения $x\text{CaO} \cdot y\text{SiO}_2$ с температурой кристаллизации в широком диапазоне от 1435 °С до 2570 °С в зависимости от состава.

Следует отметить, что наблюдаемый при росте включений сложный характер изменения содержания компонентов характерен только для относительных величин процентов, тогда как их массы монотонно увеличиваются, как это видно на рис. 5. Например, уменьшение содержания СаО и MgO (после максимума) в процентах на рис. 4 не сопровождается уходом кальция и магния в металл.

На рис. 6 показано изменение химического состава неметаллических включений в расплаве стали 12ГС при охлаждении от 1625 °С до температур 1500...1620°С.

Характерным является максимум содержания MgO в начале существенного увеличения массы включений при 1540 °С для $3 \times r_c$ и при 1570 °С для $10 \times r_c$, что может служить дополнительным доказательством насыщения ядра включений оксидом магния или выпадения его в объеме включений в виде мелкодисперсной твердой фазы.

Следует отметить подобие графиков зависимости массы и химического состава неметаллических включений на рис. 4 и 6: уменьшение температуры системы действует подобно увеличению кратности радиуса включений r/r_c . Это объясняется однонаправленным влиянием обратной температуры и радиуса включений со-

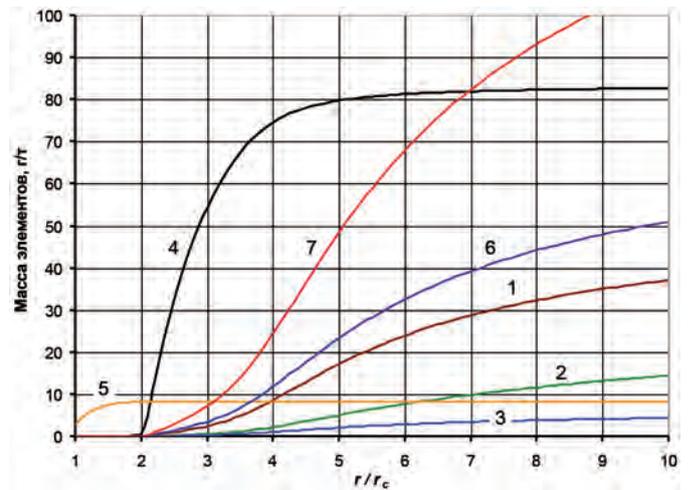


Рис. 5. Изменение массы химических элементов в эндогенных неметаллических включениях в 1 т жидкой стали 12ГС при их росте от критического размера: 1 – Si, 2 – Mn, 3 – Al, 4 – Mg*100, 5 – Ca*10000, 6 – O, 7 – Σ. Охлаждение металла от 1625 до 1500 °С

ответственно на консолидированные константы равновесия $A_{<i>}</i>$ и поправки Томсона-Гиббса λ_i в выражениях под знаком экспоненты в уравнениях (8), описывающих равновесие в системе «металл – НВ».

Выводы. Таким образом, на основе метода химических потенциалов Гиббса получены термодинамические соотношения, описывающие зарождение и рост неметаллических включений в стали. Показано, что в выражение для химического потенциала компонента фазы необходимо ввести учет кривизны поверхности неметаллического включения, зависящей от радиуса НВ и удельной поверхностной энергии. Приведены способы определения критического размера неметаллических включений.

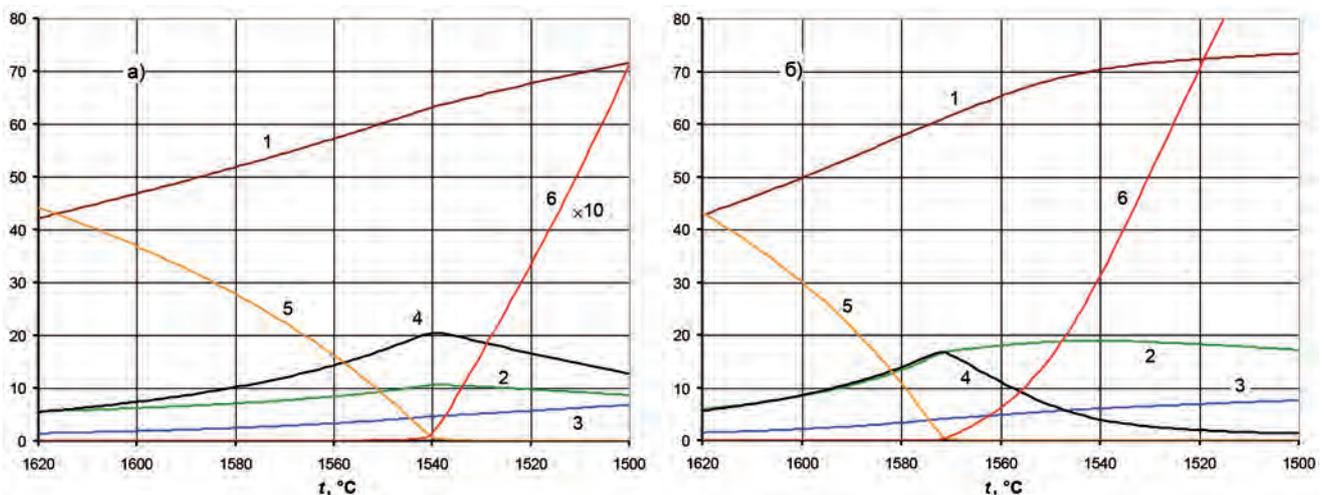


Рис. 6. Зависимость химического состава (%) и относительной массы (г/т) неметаллических включений в жидкой стали 12ГС от температуры при охлаждении от 1625 °С:
1 – SiO_2 , 2 – MnO, 3 – Al_2O_3 , 4 – MgO, 5 – CaO, 6 – отн. масса.
Относительный размер включений $3 \times$ (а) и $10 \times$ (б) критического радиуса

На основе моделирования определены закономерности изменения массы и химического состава неметаллических включений в жидкой стали при ее охлаждении.

Применительно к стали 12ГС показана возможность образования гетерогенных включений с тугоплавким ядром, насыщенных оксидами щелочноземельных металлов, и легкоплавкой гомогенной оболочкой. Предложен механизм послойного роста неметаллического включения с градиентным изменением химического состава от центра до поверхности неметаллической фазы.

Предложенная термодинамическая модель неметаллических включений не противоречит ранее разработанной модели многокомпонентной жидкой шлаковой фазы и полностью совпадает с ней при отсутствии кривизны межфазной границы и поверхностного натяжения.

Библиографический список / References

1. Kiessling R. Non-metallic Inclusions in Steel. Parts I-IV / R. Kiessling, N. Lange. – London: The Institute of Metals, 1978. – 465 p.

Kiessling R., Lange N. *Non-metallic Inclusions in Steel*. Parts I-IV. London, The Institute of Metals, 1978, 465 p.

2. Kiessling R. Non-metallic Inclusions in Steel. Part V / R. Kiessling, F. B. Pickering. – London: The Institute of Metals, 1989. – 208 p.

Kiessling R., Pickering F. B. *Non-metallic Inclusions in Steel*. Part V. London, The Institute of Metals, 1989, 208 p.

3. Люпис К. Химическая термодинамика материалов / К. Люпис. – М.: Металлургия, 1989. – 503 с.

Lyupis K. *Khimicheskaya termodinamika materialov*. Moscow, Metallurgiya, 1989, 503 p.

4. Григорян В. А. Физико-химические расчеты электросталеплавильных процессов / В. А. Григорян, А. Я. Стомахин, А. Г. Пономаренко и др. – М.: Металлургия, 1989. – 288 с.

Grigoryan V. A., Stomakhin A. Ya., Ponomarenko A. G. *Fiziko-khimicheskie raschety elektrostaleplavil'nykh pro-tsessov*. Moscow, Metallurgiya, 1989, 288 p.

5. Харченко А. В. Термодинамическая модель многокомпонентной жидкой шлаковой фазы / А. В. Харченко, Р. В. Синяков // Металлургия: наукові праці Запорізької державної інженерної академії. – 2016. – Вип. 2 (36). – С. 16–22.

Kharchenko A. V., Sinyakov R. V. *Termodinamicheskaya model' mnogokomponentnoy*

zhidkoy shlakovoy fazy. Metallurgiya: naukovi pratsi Zaporiz'koï derzhavnoï inzhenernoï akademii, 2016, issue 2 (36), pp. 16–22.

6. Харченко А. В. Дифференциальные коэффициенты усвоения в компьютерных системах управления плавкой и внепечной обработкой стали / А. В. Харченко, А. Г. Пономаренко, С. В. Довгонюк // Металлургическая и горнорудная промышленность. – 2002. – № 10. – С. 131–137.

Kharchenko, A. V., Ponomarenko A. G., Dovgonyuk S. V. *Differentsial'nye koeffitsienty usvoeniya v komp'yuter-nykh sistemakh upravleniya plavkoy i vnepechnoy obrabotkoy stali*. Metallurgicheskaya i gorno-rudnaya promyshlennost'. 2002, no. 10, pp. 131–137.

7. Кристиан Дж. Теория превращений в металлах и сплавах. Ч. 1. Термодинамика и общая кинетическая теория / Дж. Кристиан. – М.: Мир, 1978. – 808 с.

Kristian Dzh. *Teoriya prevrashcheniy v metallakh i splavakh*. Chast' 1. Termo-dinamika i obshchaya kineticheskaya teoriya. Moscow, Mir, 1978, 808 p.

Purpose. Development of thermodynamics relationships for the description of nucleation and growth of non-metallic inclusions in steel.

Methodology. Thermodynamics relationships have been obtained on the basis of Gibbs chemical potential method with Tomson-Gibbs correction term.

Findings. Thermodynamics model for non-metallic inclusions in steel has been developed; regularities of the change in the mass and chemical composition of non-metallic inclusions in liquid steel during its cooling have been determined; methods for determining the critical size of non-metallic inclusions have been suggested.

Originality. It has been shown the possibility of the formation of heterogeneous inclusions with a refractory core saturated with an alkaline-earth metal oxides, and soft melting homogeneous shell.

Practical value. Suggested thermodynamics relationships and thermodynamics model for the non-metallic inclusions in steel can be used for the analysis of the processes of formation and removal of non-metallic inclusions targeted on the ensuring of steel purity and optimization of chemical composition of inclusions.

Key words: steel, non-metallic inclusions, thermodynamics, surface energy, chemical potential, nucleus critical size.

Рекомендована к публикации
д. т. н. К. Г. Низяевым

Поступила 23.03.2017