

Д. М. Тогобицька, д.т.н., проф., ORCID 0000-0001-6413-4823

І. Р. Снігура, к.т.н., н.с., ORCID 0000-0001-5872-7403

Інститут чорної металургії ім. З. І. Некрасова НАН України

МОДЕЛЮВАННЯ МЕТАЛЕВИХ РОЗПЛАВІВ НА РІВНІ МІЖАТОМНОЇ ВЗАЄМОДІЇ

Анотація. Мета роботи полягає у створенні комплексу базових моделей для прогнозування першочергових фізико-хімічних і теплофізичних властивостей металевих розплавів для спрямованого формування якісного металопродукту та підвищення його конкурентоздатності. Підґрунтям для проведення моделювання обрана оригінальна концепція спрямованого хімічного зв'язку, ядром якої є розгляд металевих розплавів, як хімічно єдиних систем, а не механічної суміші складових елементів та врахування внеску усіх компонентів, навіть у малих концентраціях. У роботі використана важлива інформаційна складова, що представляє собою бази даних про властивості металургійних розплавів, що безперервно поповнюються сучасними даними і містять результати власних й промислових експериментальних досліджень та літературного пошуку (статті, патенти, винаходи, наукові розробки, монографії). Значимість баз даних є беззаперечною та вимагає їх виведення на міжгалузевий та міжвузівський рівень з відкритим доступом, як окремої інстанції по сприянню розвитку наукового рівня та можливостей науковців. Розроблено адекватні математичні моделі на основі інтегральних параметрів міжатомної взаємодії, а додаткове урахування параметрів мікронеоднорідності у їх структуроформуванні забезпечило високу точність оперативного прогнозу ($R^2 \geq 0,9$). Порівняльний аналіз отриманих результатів плавкості з відповідними розрахунками на основі програмного комплексу JMatPro підтвердив ефективність використання параметрів міжатомної взаємодії, як модельних. Результати досліджень рекомендуються до використання в промислових умовах з метою спрямованого формування складу та властивостей продуктів плавки, а також зниження енергетичних витрат, зменшення браку за рахунок приймання оперативних управляючих технологічних рішень за допомогою інтеграції розроблених моделей в АСУТП сталеплавильного виробництва.

Ключові слова: металеві розплави, параметри міжатомної взаємодії, моделювання, фізико-хімічні властивості, теплофізичні властивості

Посилання для цитування: Тогобицька Д. М., Снігура І. Р. Моделювання металевих розплавів на рівні міжатомної взаємодії. *Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії*. 2022. Вип. 36. С. 404-413. DOI: 10.52150/2522-9117-2022-36-404-413.

Стан проблеми. Сучасний стан металургійної промисловості зазнає суттєвих змін та все сильніше стає відчутна нагальна потреба металоспоживачів у якісних спеціальних сталях, сплавах, чавунах задля

забезпечення ефективного функціонування суміжних з металургійною галузью, зокрема, будівництва, авіації, транспортного та важкого машинобудування, електротехніки та інших. Формування якісного металу є результатом наскрізного процесу, деякі аспекти якого закладаються чистотою шихтових матеріалів, ще на етапах отримання чавуну і на всіх подальших переділах, що обов'язково проходять через стадію рідкого стану та які послідовно обумовлюють підбір необхідних технологічних рішень по доведенню й обробці металевго напівпродукту з метою задоволення вимог сформованих замовником до відповідної металопродукції. У цьому зв'язку особливу роль відіграє обґрунтування фізико-хімічних властивостей металевих, шлакових розплавів, феросплавів, механізму хімічних перетворень, протікання основних термодинамічних взаємодій між ними і встановлення закономірностей при формуванні фаз необхідно для виконання першочергового завдання теорії розплавів – прогнозування фізико-хімічних властивостей і результатів їх взаємодії.

Особливу роль у розвитку розуміння природи металевих розплавів заклали напрацювання Фішера І.З. [1], Френкеля Я.І. [2], Островського О.І. та Григоряна В.А. [3], Новохатського І.А. [4], а шлакових систем – Шенка Г. [5], Кожеурова В.І. [6], Єсіна О.А. [7], Пономаренко А.Г. [8] та інших. Однак, не дивлячись на велику кількість досліджень присвячених металургійним розплавом, все ще залишається дискусійним питання про їх структурні зміни і будову, що пов'язано з значною кількістю підходів, концепцій, моделей, уявлення щодо інтерпретації будови багатокомпонентних металевих та шлакових розплавів. Подальший розвиток уявлень про будову металевих систем є незаперечним фактом, якому посприяють поглиблені знання про структуру реальних розплавів. Вирішення даного завдання можливе за рахунок формування інформаційних ресурсів, що слугуватимуть засобом накопичення, систематизації та зберігання різнопланових даних, зібраних як експериментальним шляхом, так і з матеріалів літературних джерел, а отже є відправною сходинкою для подальшого моделювання металургійних розплавів з урахуванням особливостей конкретного запиту замовника.

Науковий прорив в області моделювання металургійних процесів на рівні міжатомної взаємодії реалізований в концепції спрямованого хімічного зв'язку розробленої Приходько Е.В. в Інституті чорної металургії ім. З. І. Некрасова [9 - 11]. Науковий відділ фізико-хімічних проблем металургійних процесів у ІЧМ продовжує справу Приходько Е.В. та розширює сфери застосування концепції, поглиблює і розкриває сутність основних постулатів міжатомної взаємодії з позицій мікронеоднорідності, що свідчить на користь актуалізації даного підходу до опису фізико-хімічних взаємодій.

Мета роботи – дослідження та моделювання металургійних розплавів з позицій фундаментальних положень концепції спрямованого хімічного

зв'язку для застосування у якості важеля впливу при подальшому направленоному формуванні якісного металу.

Основний матеріал досліджень. Ґрунтуючись на проведеному аналізі еволюції уявлень про будову металургійних розплавів їх роль та співставлення з першочерговими питаннями металургії, нами прийнято рішення про створення базисного комплексу оперативних прогнозних моделей розроблених на основі накопичених достовірних експериментальних та технологічних даних про хімічний склад, найважливіші фізико-хімічні, експлуатаційні, теплофізичні властивості металургійних розплавів (сталь, шлак, добавка). Згідно відправних положень концепції спрямованого хімічного зв'язку: хімічна індивідуальність системи, реакційна здатність, структурний стан розплавів виражаються за допомогою методу кодування хімічного складу дослідного розплаву в інтегральних параметрах міжатомної взаємодії: Z^Y – параметр зарядового стану системи, e ; d – середньостатистична між'ядерна відстань, 10^{-1}nm ; tga – константа для кожного елемента, яка характеризує градієнт зміни радіусу іона при зміні його заряду; r_1 – спрямована зарядова щільність, e/nm .

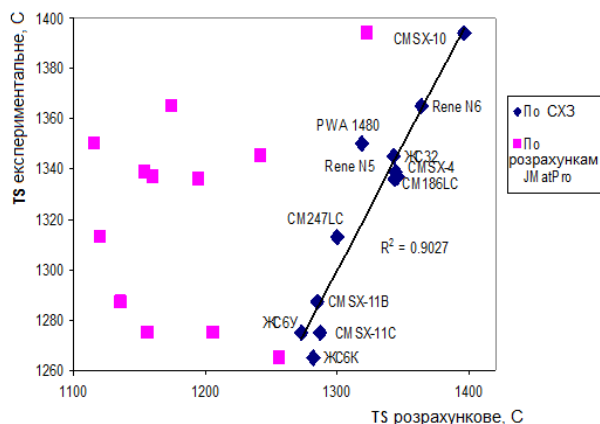
У якості вихідних даних при моделюванні нами використано інформаційний ресурс, створений в ІЧМ НАНУ - репрезентативні бази даних «Банка даних «Металурґія» (БДМет) – «Метал», «Шлак», «Феросплави» [12], які знаходяться в стадії постійної експлуатації і активного поповнення сучасними промисловими (ПАТ «ДМК», ПрАТ «Дніпроспецсталь», ПАТ «АрселорМіттал Кривий Ріг» та інші) та літературними (статті, патенти, винаходи, наукові розробки, монографії) даними. Інформаційна потужність таких баз даних дозволяє оперативно генерувати моделі зі зменшенням їх розмірності та забезпеченням відповідної стійкості при зміні вхідних даних. Беручи за основу вказані напрацювання розроблені оперативні прогнозні моделі для визначення температур плавлення та кристалізації, в'язкості, щільності залізовуглецевих, хромонікелевих сталей широкого сортаментного ряду, алюмінієвих, магнієвих, жароміцних нікелевих сплавів з високими показниками детермінованості на рівні $R^2 \geq 0,97$ [13]. Працездатність усіх розроблених аналітичних залежностей оцінювалась шляхом співставлення з експериментальними значеннями, іншими розрахунковими підходами та розрахунками за програмними комплексами, а також на даних, які не входили в висхідні вибірки при генерації моделей, що підтвердило їх адекватність та математичну стійкість.

Зокрема, показовими є одержані результати для жароміцних нікелевих сплавів (табл.1.) при застосуванні параметрів міжатомної взаємодії, точність прогнозу температур плавлення та кристалізації значно вища, ніж у авторів роботи [14]. Як показав порівняльний аналіз прогнозних значень по запропонованій моделі (похибка прогнозу - ξ , % = 0,66%) для

жароміцних нікелевих сплавів, а при проведенні розрахунків з використанням програмного спеціалізованого комплексу JMatPro спостерігається значна розбіжність та похибка прогнозу зростає до $\xi, \% = 10,30\%$ (рис. 1), що спричинено виходом за границі діапазону хімічних складів досліджуваних сплавів, для яких був розроблений цей програмний пакет заснований на модифікованому наближенні Шайла [15].

Таблиця 1 – Оцінка точності даних прогнозних моделей по визначенню T_L та T_S для жароміцних нікелевих сплавів, які не ввійшли в початкову вибірку

| Марка сплаву | $T_{L\text{експ}}$ °C | $T_{S\text{експ}}$ °C | По моделям авторів роботи [14] $T_L; T_S = f(\Sigma\gamma)$ | | По розробленим моделям $T_L; T_S = f(\rho_{\text{изар}}, \text{tg}\alpha_\gamma)$ | |
|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--|------------------------------|--|------------------------------|
| | | | $T_{L\text{розрах}}$, °C | $T_{S\text{розрах}}$, °C | $T_{L\text{розрах}}$, °C | $T_{S\text{розрах}}$, °C |
| PWA – 1426 | 1381 | 1342 | 1393,69 | 1323,085 | 1402,265 | 1342,318 |
| RENE – 142 | 1376 | 1338 | 1395,911 | 1326,598 | 1401,929 | 1341,688 |
| PWA – 1484 | 1403 | 1350 | 1418,674 | 1362,603 | 1403,161 | 1343,998 |
| RENE – N4 | 1341 | 1271 | 1375,924 | 1294,983 | 1363,616 | 1295,392 |
| Похибка прогнозу, (%) | | | 1,52 | 1,27 | 1,28 | 0,66 |



Сучасні розрахунково-прогнозні методи, які застосовуються для феросплавних розплавів потребують уточнень, оскільки не здатні охопити повний хімічний склад феросплаву та часто нехтують малими концентраціями компонентів сплаву. Також при їх використанні слід враховувати, що похибка прогнозу спричинена вибором у якості підґрунтя при їх розробці даних по двухкомпонентним металургійним системам. Таким чином, особливий практичний та науковий інтерес представляють

оперативні методи визначення і прогнозування властивостей багатокомпонентних металевих розплавів феросплавів з використанням сучасних інформаційних технологій та врахування усіх складових елементів розплаву.

По аналогії з прогнозуванням металевих розплавів сталей, у якості відправних положень при моделюванні феросплавних багатокомпонентних розплавів феросиліцію, феромарганцю, феросилікомарганцю та інших вітчизняного виробництва обрана концепція спрямованого хімічного зв'язку. Для цього була сформована представницька покласова вибірка хімічних складів і властивостей феросплавів (температура плавлення (T_n , °C), щільність ($D \times 10^3$, кг/м³), окислюваність та теплофізичні характеристики - теплопровідність λ , Вт/м·К, теплоємність C , Дж/кг·К, теплота плавлення $Q_{пл}$, кДж/кг, коефіцієнт температуропровідності $\alpha \cdot 10^{-3}$, м²/с та ін.) і проведена розрахунково-аналітична оцінка взаємозв'язків з інтегральними параметрами міжатомної взаємодії та з урахуванням індивідуальних особливостей їх факторного навантаження при моделюванні. Наприклад, для феросиліцію спостерігається вплив мікронеоднорідності, вираженої параметром ρl на теплопровідність феросплаву (рис. 2а). З збільшенням значення параметру ρl знижується теплопровідність розплаву (рис. 2а), оскільки утворюються стійкі кластерні угруповання, для яких необхідно докласти значну кількість теплоти плавлення, щоб гомогенізувати систему, адже для них характерний високий електроопір створений сильними міжчастковими зв'язками.

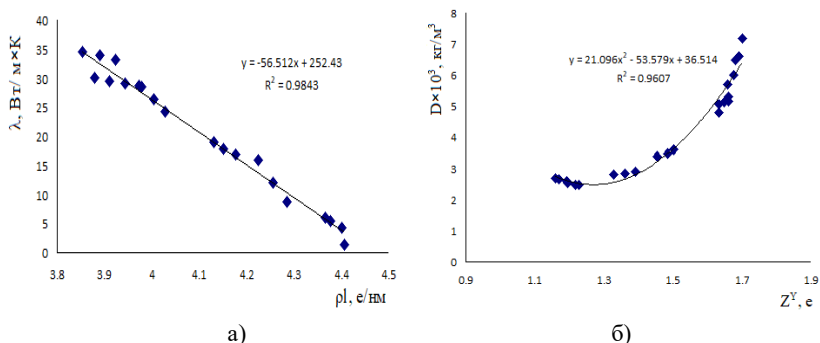


Рисунок 2 – Взаємозв'язок параметрів міжатомної взаємодії з властивостями феросиліцію: а) теплопровідність; б) щільність.

Значення щільності промислових феросплавів для ефективного протікання реакцій взаємодії на границі розділу фаз «метал-добавка» повинні бути наближені до щільності металевого розчину в який вводиться добавка (зазвичай на рівні 5000-7000 кг/м³). До таких належать ФС20, ФС25, ФС45, які займають верхнє положення на рис.2б та щільність, яких

лімітується зарядовим станом системи Z^Y . У той же час, для марок ФС90, ФС92 низькі значення параметру Z^Y до 1.3 (рис. 2б), які спричинені наближенням цих розплавів до моносплаву по вмісту кремнію та низька щільність приведуть до їх впливання над металевим розплавом сталі, активного окислення та низького коефіцієнту засвоєння провідного елементу.

Враховуючи інформативність параметрів міжатомної взаємодії та високу точність опису властивостей феросиліцію сформовані моделі, які мають вид: $T_{пл} = f(Z^Y, \rho_1) R^2 = 0,6488$; $D = f(Z^Y) R^2 = 0,9607$; $C_{тв} = f(d) R^2 = 0,7696$; $\lambda = f(\rho_1) R^2 = 0,9843$; $Q = f(\rho_1) R^2 = 0,9537$; $\rho = f(\rho_1) R^2 = 0,9666$; $\sigma = f(\text{tg}\alpha) R^2 = 0,9817$.

Оскільки у вітчизняному металургійному виробництві активно використовують феромарганець та феросилікомарганець зазвичай для розкислення сталі, однак також використовується і для її легування в залежності від поставлених вимог замовника до металопродукції, досліджено взаємозв'язки їх властивостей з параметрами міжатомної взаємодії, що дозволили отримати аналітичні вирази виду: $T_{пл} = f(d, \rho_1) R^2 = 0,70$; $D = f(Z^Y, d) R^2 = 0,763$; $C_{тв} = f(Z^Y, d, \rho_1) R^2 = 0,874$; $\lambda = f(\rho_1, d, \text{tg}\alpha) R^2 = 0,870$; $Q = f(Z^Y, \text{tg}\alpha) R^2 = 0,95$; $\rho = f(Z^Y, \Delta d, \rho_1) R^2 = 0,917$; $\sigma = f(Z^Y, \Delta d, \rho_1) R^2 = 0,7578$.

Час плавлення є однією з важливих характеристик феросплавів, яка дозволяє визначити як ступінь ефективності їх засвоєння, так і розподілу провідних елементів сплаву в залізвуглецевих розплавах, проведено аналіз взаємозв'язків параметрів міжатомної взаємодії з часом плавлення феросплавів, який дозволив встановити, що найбільш інформативним є параметр мікронеоднорідності ρ_1 , що враховує кластероутворення в металевих розплавах. Тому час плавлення феросплаву може носити описовий характер початку руйнування кластерних зв'язків [4, 16]. Для визначення часу плавлення комплексних феросплавів розроблені моделі у системах: *Fe-Mn-V*, *Fe-Mn-Nb*, *Fe-Nb-Si*, *Fe-Nb-Al*, *Fe-Si-B*, *Fe-Mn-Si-V*, *Fe-Nb-Si-Al*, *Fe-Si-V-Mn*, *Fe-Mn-Si-V-Ti*, *Fe-Mn-Si-Nb-Al*.

Для марганецьвмісних феросплавів:

$$\tau, c = f(\rho_1) \quad R^2 = 0.982 \quad (1)$$

Для ванадійвмісних феросплавів:

$$\tau, c = f(\rho_1, \text{tg}\alpha) \quad R^2 = 0.692 \quad (2)$$

Для ніобійвмісних феросплавів:

$$\tau, c = f(Z^Y, d, \Delta Z^Y, \Delta d) \quad R^2 = 0.725 \quad (3)$$

Для борвмісних феросплавів:

$$\tau, c = f(\rho_1, d) \quad R^2 = 0.903 \quad (4)$$

Висока точність прогнозу досягнута за рахунок врахування фізико-хімічної індивідуальності кожної із систем вираженої у інтегральних параметрах міжатомної взаємодії та їх мікронеоднорідності.

Запропонований комплекс моделей для прогнозування фізико-хімічних, теплофізичних властивостей металевих розплавів та результати експертної оцінки їх адекватності дають основу вважати, що стануть дієвим інструментом для оцінки та прийняття керуючих впливів для виплавки сталі заданої якості. Значна узгодженість між експериментальними та розрахунковими значеннями властивостей металевих розплавів дозволяє рекомендувати їх для інтеграції в системи АСНД та АСУТП сталеплавильного виробництва.

Висновки

Сформовані бази експериментальних даних фізико-хімічних, теплофізичних властивостей феросплавів та моделей структури металевих розплавів створили передумови для прогнозування першочергових властивостей (температура плавлення та кристалізації, щільність, в'язкість, електропровідність та інші) сталей, сплавів та феросплавів вітчизняного виробництва з урахуванням їх фізико-хімічних особливостей та мікронеоднорідної будови на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку з високою точністю прогнозу.

З позиції концепції спрямованого хімічного зв'язку розглянуті металеві розплави залізобуглецевих, хромонікелевих сталей, алюмінієвих, магнієвих, жароміцних нікелевих сплавів з залученням інтегральних параметрів міжатомної взаємодії та розроблені аналітичні залежності для прогнозування їх основних фізико-хімічних властивостей.

Проведена експертна оцінка розроблених моделей у порівнянні з існуючими підходами та провідними спеціалізованими комп'ютерними програмами, що підтвердило їх стійкість та працездатність.

Розроблені моделі для металевих розплавів являються блоковими складовими алгоритмічного і програмного забезпечення для подальшої оцінки ефективності розподілу елементів в системі «метал-шлак-добавка».

Перелік посилань

1. Фишер И. З. Статистическая природа жидкостей. М. : Изд-во АН СССР, 1961. 212 с.
2. Френкель Я. И. Введение в теорию металлов. Л. : Наука, 1972. 424 с.
3. Островский О. И., Григорян В. А. О структурных превращениях в металлических расплавах. *Известия вузов. Чёрная металлургия*. 1985. № 5. С. 1–12.
4. Ладьянов В. И., Новохатский И. А., Логунов С. В. Оценка времени жизни кластеров в жидких металлах. *Металлы*. 1995. № 2. С. 13 – 22.
5. Шенк Г. Физико-химия металлургических процессов. М. : ОНТИ, 1935. 383 с.
6. Кожеуров В. А. Термодинамика металлургических шлаков. Свердловск : Металлургиздат, 1955. 163 с.
7. Есин О. А. О полимерной модели расплавленных силикатов и других окислов. *Сталь*. 1979. № 7. С. 497-500.

8. Пономаренко А. Г. Вопросы термодинамики фаз переменного состава, имеющих коллективную электронную фазу. I. Свободная энергия фазы. *Журнал физической химии*. 1974. Т. 48. № 7. С. 1668–1671.
9. Приходько Э. В. Эффективность комплексного легирования сталей и сплавов. К. : Наукова думка, 1995. 292 с.
10. Приходько Э. В. О физико-химической модели структуры металлических расплавов. *Изв. АН СССР. Металлы*. 1986. № 4. С. 20–26.
11. Приходько Э. В. Металлохимия многокомпонентных систем. М. : Металлургия, 1995. 320 с.
12. Базы данных и модели для экспертной оценки эффективности использования ферросплавов при производстве стали. / Д. Н. Тогобицкая, В. П. Пиптюк, А. Ф. Петров и др. *Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии*. Вып. 31. 2017. С. 150–165.
13. Компьютерное моделирование температур плавления и кристаллизации сплавов специального назначения / Д. Н. Тогобицкая, М. Шапер, О. Гридин, И. Р. Снигура // *Сталь*. 2018. № 6. С. 11 – 15.
14. Гайдук С. В., Кононов В. В., Куренкова В. В. Получение прогнозирующих математических моделей для расчета термодинамических параметров литейных жаропрочных никелевых сплавов. *СЭМ*. 2015. № 5. С. 31-37.
15. K. D. Carlson & C. Beckermann. Determination of solid fraction–temperature relation and latent heat using full scale casting experiments: application to corrosion resistant steels and nickel based alloys. *International Journal of Cast Metals Research*. 2012. Vol. 25. Issue 2. P. 75-92. DOI: 10.1179/1743133611Y.0000000023.
16. Скребцов А. М. Температура полного распада кластеров металлического расплава. Каково ее значение? *Известия вузов. Чёрная металлургия*. 2009. № 2. С. 28–32.

References

1. Fisher I. Z. *Statisticheskaia priroda zhidkosti*. Moskva: Izd-vo AN SSSR, 1961. 212 p.
2. Frenkel Ia. I. *Vvedenie v teoriyu metallov*. Leningrad: Nauka, 1972. 424 p.
3. Ostrovskii O. I., Grigorian V. A. O strukturnykh prevrashcheniiakh v metallicheskih rasplavakh. *Izvestia vuzov. Cher. metallurgiya*. 1985. No. 5. P. 1–12.
4. Ladianov V. I., Novokhatskii I. A., Logunov S. V. Otsenka vremeni zhizni klasterov v zhidkikh metallakh. *Metally*. 1995. No. 2. P 13–22.
5. Shenk G. *Fiziko-khimiia metallurgicheskikh protsessov*. Moskva: ONTI, 1935. 383 p.
6. Kozheurov V. A. *Termodinamika metallurgicheskikh shlakov*. Sverdlovsk: Metallurgizdat. 1955. 163 p.
7. Esin O. A. O polimernoi modeli rasplavlennykh silikatov i drugikh okislov. *Stal*. 1979. No. 7. P. 497-500.
8. Ponomarenko A. G. Voprosy termodinamiki faz peremennogo sostava imeiushchikh kollektivnuiu elektronnoiu fazu. I. Svobodnaia energiiia fazy. *Zhurnal fizicheskoi khimii*. 1974. Vol. 48. No. 7. P. 1668–1671.
9. Prikhodko E. V. Effektivnost kompleksnogo legirovaniia stalei i splavov. Kyiv Naukova dumka, 1995. 292 p.
10. Prikhodko E. V. O fiziko-khimicheskoi modeli struktury metallicheskih rasplavov. E. V. Prikhodko. *Izv. AN SSSR. Metally*. 1986. No. 4. P. 20 – 26.

11. Prikhodko E. V. Metallokhimiia mnogokomponentnykh system. Moskva: Metallurgii, 1995. 320 p.
12. Togobitskaia D. N. Bazy dannykh i modeli dlia ekspertnoi otsenki effektivnosti ispolzovaniia ferrosplavov pri proizvodstve stali. / D. N. Togobitskaia, V. P. Piptiuk, A. F. Petrov, S. V. Grekov, I. R. Snigura, I. U. M. Likhachev, L. A. Golovko // *Fundamentalnye i prikladnye problemy chernoi metallurgii*. 2017. Collection 31. P. 150–165.
13. Togobitskaia D. N., Shaper M., Gridin O., Snigura I. R. Kompiuternoe modelirovanie temperatur plaveniia i kristallizatsii splavov spetsialnogo naznacheniia. *Stal*. 2018. No. 6. P. 11–15.
14. Gaiduk S. V., Kononov V. V., Kurenkova V. V., Poluchenie prognoziruuiushchikh matematicheskikh modelei dlia rascheta termodinamicheskikh parametrov liteinykh zharoprochnykh nikelevykh splavov. *SEM*. 2015. No 5. P. 31-37.
15. K. D. Carlson, C. Beckermann. Determination of solid fraction–temperature relation and latent heat using full scale casting experiments: application to corrosion resistant steels and nickel based alloys, *International Journal of Cast Metals Research*, 2012. Vol. 25. Issue 2. P. 75-92. DOI: 10.1179/1743133611Y.0000000023
16. Skrebtsov A. M. Temperatura polnogo raspada klasterov metallichesкого расплава. Kakovo ee znachenie? *Izvestiia vuzov. Chernaya metallurgii*. 2009. No. 2. P. 28–32.

D. N. Togobitskaya, D. Sc. (Tech.), Professor, ORCID 0000-0001-6413-4823

I. R. Snihura, Ph. D. (Tech.), Researcher, ORCID 0000-0001-5872-7403

Iron and Steel Institute of Z. I. Nekrasov National Academy of Sciences of Ukraine

MODELING OF METAL MELTS AT THE LEVEL OF INTERATOMIC INTERACTION

Summary. The purpose of the work is to create a complex of basic models for predicting the primary physicochemical and thermophysical properties of metal melts for the targeted formation of a high-quality metal product and increasing its competitiveness. The basis for modeling is the original concept of directional chemical bonding, the core of which is the consideration of metal melts as chemically unified systems, rather than a mechanical mixture of constituent elements, and taking into account the contribution of all components, even in small concentrations. The work uses an important information component, which is a database on the properties of metallurgical melts, which is continuously updated with modern data and contains the results of own and industrial experimental research and literature search (articles, patents, inventions, scientific developments, monographs). The importance of databases is indisputable and requires them to be brought to the inter-branch and inter-university level with open access, as a separate instance for promoting the development of the scientific level and the capabilities of scientists. Adequate mathematical models were developed based on integral parameters of interatomic interaction, and additional consideration of micro-heterogeneity parameters in their structural formation ensured high accuracy of operational forecast ($R^2 \geq 0.9$). A comparative analysis of the obtained melting results with the corresponding calculations based on the JMatPro software complex confirmed the effectiveness of using the interatomic interaction parameters as model ones. The results of the research are recommended for use in industrial conditions for the purpose of targeted formation of the

composition and properties of smelting products, as well as reducing energy costs and reducing defects due to the adoption of operational management technological decisions with the help of the integration of the developed models in the automated control systems of technological processes of steelmaking.

Key words: metal melts, parameters of interatomic interaction, modeling, physical and chemical properties, thermophysical properties.

For citation: Togobitskaya D. N., Snihura I. R. Modeliuvannia metalevykh rozplaviv na rivni mizhatomnoi vzaiemodii [Modeling of metal melts at the level of interatomic interaction]. *Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy*. 2022. Collection 36. P. 404-413. [In Ukrainian]. DOI: 10.52150/2522-9117-2022-36-404-413.

*Стаття надійшла до редакції збірника 24.10.2022 р.
Рекомендовано до друку редколегією збірника (Протокол № 5 від 20.12.2022 р.)*