

8D072 – «Өңдеу және өндіру салалары» даярлау бағыты, 8D07203 – «Металлургия» білім беру бағдарламасы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін алу үшін ұсынылған диссертацияға
АҢДАТПА

БЕКБАЕВА ЛӘЗЗӘТ АҚЫЛБАЙҚЫЗЫ

**МЕТАЛЛ ҚОРЫТПАЛАРЫ ЖӘНЕ КҮРДЕЛІ БЕЙОРГАНИКАЛЫҚ
ЗАТТАР БАЛҚЫМАЛАРЫНЫҢ ТҮТҚЫРЛЫҒЫНА ҚАТЫСТЫ
СҰЙЫҚТЫҚТЫҢ КЛАСТЕРЛІ-АССОЦИАЦИЯЛЫҚ ТЕОРИЯСЫН
ДАМУ**

Тақырыптың өзектілігі. Заттардың қасиеттерін зерттеу қажеттілігі техниканың өсіп келе жатқан сұраныстарымен қатар, алынатын нәтижелердің ғылыми маңыздылығымен де анықталады. Осы тұрғыдан алғанда, қазіргі техникада кеңінен қолданылып келе жатқан бейорганикалық қосылыстар балқымаларының қасиеттерін зерттеу ерекше қызығушылық тудырады. Әртүрлі бейорганикалық қосылыстардың физикалық табиғаты оларды теориялық және эксперименттік тұрғыдан зерттеу ерекшеліктерін айқындайды. Соңғы жылдары бейорганикалық қосылыстар балқымаларының физика-химиялық және жылуфизикалық қасиеттеріне қатысты көптеген зерттеулер жүргізілді. Тығыздық, жылуөткізгіштік, жылу сыйымдылық, қаныққан бу қысымы сияқты қасиеттермен қатар, тұтқырлық та ерекше маңызға ие, себебі ол жүйенің гидродинамикалық және жылуалмасу сипаттамаларын анықтайтын негізгі параметр болып табылады. Күрделі бейорганикалық қосылыстар мен металл қорытпалары балқымаларының тұтқырлығын жан-жақты зерттеу ғылыми әрі практикалық тұрғыдан маңызды, өйткені тұтқырлық сұйықтың құрылымдық-сезімтал сипаттамасы ретінде бөлшектер арасындағы өзара әсер күштерін бағалауға мүмкіндік береді.

Қазіргі уақытта көптеген зерттеушілер сұйық күйді, балқымалар мен қорытпаларды зерттеу барысында квазикристалдық сипаттама концепциясына негізделген модельдерді қолдануды жөн көреді. Бұл сұйық құрылымының кристалдық денеде байқалатын бөлшектер арасындағы нақты өзара әсерлер негізінде модельденетінін білдіреді. Аталған тәсіл заттың конденсацияланған күйінің бірлігіне және балқу нүктесіне дейін де, одан кейін де әсер ететін тартылыс күштеріне негізделген.

Балқымалардың тұтқырлығын есептеу әдістері олардың қасиеттерін түсіну мен зерттеудің маңызды құралы болып табылады. Бұл әдістер дифракциялық зерттеулер, псевдопотенциалдық теория, Вороной көпжақтарының статистикалық геометриясы сияқты әртүрлі модельдік теорияларға негізделген. Осы әдістердің арқасында сұйық металдардың қасиеттері мен құрылымы жөнінде үлкен көлемде эксперименттік мәліметтер жиналды. Алайда бұл саладағы елеулі жетістіктерге қарамастан, барлық модельдердің өзіндік шектеулері мен жуықтаулары бар және олар тек тар температуралық диапазонда ғана жұмыс істейді. Нәтижесінде әртүрлі

әдістермен алынған тұтқырлық деректері өзара айтарлықтай айырмашылық көрсетуі мүмкін (кейде бір реттік шамадан да артық).

Осыған байланысты балқымалардың тұтқырлығын түсіндірудің балама тәсілдерін әзірлеу және әртүрлі жағдайларда осы сипаттаманы дәлірек анықтау қажеттілігі туындайды, сондай-ақ жаңа мәліметтерді металлургиялық процестерде қолдану маңызды болып табылады.

Берілген диссертациялық жұмыс Ж. Әбішев атындағы Химия-металлургия институтының қызметкерлері ұсынған және негіздеген хаотизацияланған бөлшектер концепциясын одан әрі дамытуға арналған және оны едәуір толықтыру мен жетілдіруді көздейді, себебі жұмыс балқымалар мен жалпы сұйық күйдің құрылысы мен қасиеттері теориясын іргелі негіздеуге бағытталған.

Жұмыстың мақсаты – бейорганикалық заттар мен металл қорытпалары балқымаларының тұтқырлығының температуралық тәуелділігін сипаттау және болжау үшін заттың сұйық күйінің кластерлі-ассоциациялық теориясын модификациялау.

Зерттеу нысаны: бейорганикалық қосылыстар мен металл қорытпалары балқымаларының тұтқырлығы бойынша анықтамалық эксперименттік және тегістелген деректер.

Зерттеу пәні: күрделі бейорганикалық қосылыстар мен металл қорытпалары балқымаларының динамикалық тұтқырлығының температуралық тәуелділігі.

Зерттеу міндеттері:

1. Балқымалар мен жалпы сұйық күйдің құрылысы мен қасиеттері бағытының қазіргі жағдайын талдау. Тұтқырлықтың температураға тәуелділігінің негізгі есептік тәуелділіктерін талдау, олардың жуықтау сипаты мен қателік көздерін анықтау.

2. Сұйықтағы қатты фазалы кластерлердің түзілуі мен өмір сүруінің виртуалдылығын тұтқырлықтың материалдық субстраты ретінде ықтималдық тұрғыдан анықтау және сандық өрнектеу.

3. Үш және одан да көп атомды күрделі бейорганикалық заттар балқымаларының тұтқырлығының температуралық тәуелділігін сипаттау үшін сұйықтың кластерлі-ассоциациялық моделін Френкель теңдеуімен біріктіріп қолдану.

4. Металл қорытпалары балқымаларының тұтқырлығының температуралық тәуелділігін олардың фазалық диаграммалары негізінде сипаттау үшін кластерлі-ассоциациялық модельді қолдану.

Ғылыми жаңалығы:

– бейорганикалық қосылыстар мен металл қорытпалары балқымаларына арналған жалпыланған жартылай эмпирикалық тұтқырлық моделін құру үшін бірыңғай көрсеткішті (кластерлердің агрегация және ассоциация дәрежесін) пайдалану;

– Френкель теңдеуін модификациялау негізінде күрделі бейорганикалық қосылыстар мен металл қорытпалары үшін тұтқыр ағыс активация энергиясын анықтау;

– сұйықтықтағы қатты фазалы кластерлердің болуын және кристаллқозғалмалы бөлшектерден кластерлердің түзілу виртуалдылығын тұтқырлықтың материалдық консистенциясы ретінде сандық тұрғыдан негіздеу;

– алғаш рет күрделі бейорганикалық қосылыстар үшін кластерлер ассоциациясы дәрежесінің Д.И. Менделеев элементтер жүйесіндегі период өзгерісімен заңды байланысы анықталды, бұл жаңа кластерлі-ассоциациялық модельдің функционалдық сипатын алғашқы жуықтауда растайды.

Жоспарланған зерттеулердің принциптік жаңалығы сұйық күйдің бұрын тек құрылымдық тәсіл шеңберінде қарастырылуымен байланысты. Диссертациялық жұмыс толығымен сұйық күй табиғатын заттың құрылымсыз, хаотизацияланған құрамдас бөлігі арқылы ашуға негізделген, ал бұрын бұл құрамдас бөлік сұйықтың құрылымдық анықтылығына кедергі ретінде ғана қарастырылған. Жаңа тәсіл алғаш рет күрделі заттардың сұйық күйіндегі тұтқырлық сипаттамаларын толық диапазонда үйлестіріп сипаттауға мүмкіндік берді.

Жұмыстың практикалық маңыздылығы. Металлургияда тұтқырлықты зерттеудің практикалық маңызы зор, себебі ол балқыту, құю және металдарды тазарту процестерін дәлірек басқаруға мүмкіндік береді. Балқымалардың тұтқырлығын білу олардың аққыштығын болжауға, қалыптардың біркелкі толуын қамтамасыз етуге, құймалардың сапасын арттыруға және ақаулар санын азайтуға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, қождар мен балқымалардың тұтқырлығын бақылау қоспаларды тиімді жоюға және балқыту агрегаттарындағы жылуалмасуды жақсартуға ықпал етеді. Мұның барлығы өндірістің тұрақтылығына, процестердің үнемділігіне және соңғы өнімнің қасиеттеріне тікелей әсер етеді.

Практикалық тұрғыдан тұтқырлық туралы мәліметтер металлургиялық процестерді жобалау мен оңтайландыруда аса маңызды. Құю процестерінде балқыма тұтқырлығы оның сұйыққақыштығын, күрделі пішінді қалыптарды толтыру қабілетін, беткі қабаттың қалыптасуын және шөгу қуыстары мен газдық кеуектілік сияқты ақаулардың түзілу ықтималдығын анықтайды. Тұтқырлық сипаттамаларын жеткіліксіз ескеру құю қалыптарының біркелкі толмауына және құйма сапасының төмендеуіне әкелуі мүмкін. Металлургиялық агрегаттарда (домна, мартен, электр пештері) балқыма тұтқырлығы жылу- және массаалмасу процестеріне, араластыру қарқындылығына, легирлеуші элементтердің еру жылдамдығына және тазарту тиімділігіне әсер етеді. Мысалы, қож немесе металл балқымасының тұтқырлығының өзгеруі химиялық реакциялар кинетикасына және «металл-қож» фазаларының бөлінуіне елеулі ықпал етеді.

Жұмыстың практикалық маңыздылығы хаотизацияланған бөлшектер концепциясына негізделген күрделі бейорганикалық заттар, металл қорытпалары және қож жүйелері балқымаларының тұтқырлығының жалпыланған жартылай эмпирикалық моделін әзірлеуде болып табылады. Жаңа кластерлі-ассоциациялық модельде жаңа параметрлер – кластерлердің ассоциация дәрежесі және ассоциаттардың агрегация дәрежесі қолданылады.

Алынған нәтижелер балқымалардың тұтқырлығын кең температуралық аралықта, соның ішінде қайнау температурасына жақын аймақта есептеуге мүмкіндік береді, бұл олардың технологиялық қасиеттерін болжау мүмкіндіктерін едәуір кеңейтеді. Ұсынылған тәсіл балқыту, құю және тазарту процестерін оңтайландыруда, сондай-ақ металлургиялық агрегаттардың тиімді технологиялық режимдерін таңдауда қолданылуы мүмкін.

Балқымалардың мінез-құлқын бүкіл температуралық диапазонда болжау үшін эксперименттік реперлік нүктелердің шектеулі санын пайдалану мүмкіндігі анықталды. Cu-Sn және Cu-Al жүйелерін қоса алғанда, қорытпалар мысалында ликвидус сызығының орналасуы мен балқымадағы кластерлер үлесі арасында сандық өзара байланыс орнатылды, бұл фазалық диаграммаларды тұтқырлық сипаттамаларын есептеу және қорытпалардың технологиялық қасиеттерін болжау үшін пайдалануға мүмкіндік береді. Әзірленген кластерлі-ассоциациялық модель термодинамикалық параметрлерді (компоненттердің араласу және балқу жылулары) ескере отырып нақтыланды, бұл бастапқы деректердің минималды жиынтығы негізінде тұтқырлықтың барабар математикалық сипаттамасын алуға мүмкіндік берді. Жаңа модельді қож жүйелерінде (соның ішінде CaO-SiO₂-Al₂O₃-MgO-MnO) эксперименттік тексеру есептік және эксперименттік деректердің жоғары сәйкестігін көрсетті, бұл оның нақты металлургиялық процестерді модельдеуде қолданылу мүмкіндігін растайды. Алынған тұтқыр ағыс активация энергиясының мәндері әзірленген тәсілді сұйық фазалы процестердің кинетикалық параметрлерін сандық бағалау үшін пайдалануға мүмкіндік береді.

Хаотизацияланған бөлшектер тұжырымдамасының авторлары «Металдардың балқымалылығы мен пластикалылығы» атты еңбекте металдардың балқымалылығы мен пластикалылығының жаңа түсіндірмелері беріліп, пластикалылықтың оңтайлы аймағы мен Бочвар-Тамман температурасы негізделген. Бұл прокат стандартының энергетикалық пайдалы әсер коэффициентін анықтауға және мыстың тұтқырлығының кластерлі-ассоциациялық моделі негізінде Жезқазған тау-кен металлургия комбинатында жоғары сапалы мыс катанкасын алуға мүмкіндік берді.

Жұмыс нәтижелері оқу үдерісіне енгізіліп, «Материалдардың беріктігін бағалаудың жаңа тәсілдері» пәнін оқытуда қолданылуда, бұл металлургия саласындағы мамандарды даярлау сапасын арттыруға ықпал етеді.

Қорғауға ұсынылатын негізгі қағидалар:

– сұйықтағы қатты фазалы кластерлердің түзілуі мен өмір сүру виртуалдылығының тұтқырлық консистенциясының құрамдас бөлігі ретіндегі сандық өрнегін негіздеу;

– күрделі бейорганикалық заттар мен металл қорытпалары балқымаларына қатысты кристаллқозғалмалы, сұйыққозғалмалы және буқозғалмалы хаотизацияланған виртуалды бөлшектер үлестерін ескеру негізінде балқымалардың тұтқырлығы мен аққыштығы теориясын әзірлеу;

– күрделі (үш және одан да көп атомды) бейорганикалық заттар балқымаларының тұтқырлығының температуралық тәуелділігін сипаттау

үшін сұйықтың кластерлі-ассоциациялық модельдерін Френкель теңдеуімен біріктіру;

– қорытпа тұтқырлығының температуралық тәуелділігі мен олардың фазалық диаграммасы арасындағы өзара байланысты негіздеу (Cu-Sn мысалында);

– динамикалық тұтқырлыққа қатысты Френкель теңдеуін модификациялау негізінде күрделі бейорганикалық қосылыстар мен металл қорытпалары үшін тұтқыр ағыс активация энергиясы бойынша деректер.

Ғылыми-зерттеу жұмысының орындалған орны: Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті (МжЖМ кафедрасы), Ж. Әбішев атындағы Химия-металлургия институты.

Диссертациялық жұмыстың орындалуы ЖТН АР05130844 (2018-2020 жж.) «Металдық қорытпалар мен бейорганикалық қоспа балқытпалары үшін бейберекет бөлшектердің тұжырымдамасы негізінде аққыштық пен тұтқырлықтың жаңа теориясын дайындау және қолдану» атты гранттық жобаны іске асырумен байланысты. Диссертациялық зерттеу аталған жобаның логикалық жалғасы болып табылады. Жоба аясында алынған ғылыми нәтижелер зерттеулерді одан әрі дамытуға және күрделі бейорганикалық заттар мен металдық қорытпалар балқымаларының тұтқырлығын сипаттайтын кластерлі-ассоциациялық модельді әзірлеуге негіз болды.

Диссертанттың жеке үлесі

Автор ғылыми әдебиеттерге талдау жүргізуді, күрделі бейорганикалық қосылыстар мен металл қорытпалары балқымаларының тұтқырлығы бойынша эксперименттік деректерді өңдеу мен жүйелеуді, сұйық күйдің кластерлі-ассоциациялық моделін жетілдіруді, есептік тәуелділіктерді әзірлеуді, есептеу зерттеулерін және әзірленген модельді тексеру бойынша эксперименттік жұмыстарды өз бетінше орындады. Автор жаңа модельді қож жүйелерінде, оның ішінде $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-MnO}$ жүйесінде эксперименттік түрде тексерді, бұл есептік және эксперименттік деректердің жоғары сәйкестігін көрсетіп, модельді нақты металлургиялық процестерді модельдеуде қолдану мүмкіндігін растады.

Автор алынған нәтижелерді талдау мен түсіндіруге, ғылыми мақалалар мен жарияланымдарды дайындауға, сондай-ақ зерттеу нәтижелерін ғылыми конференциялар мен семинарларда апробациялауға тікелей қатысты.

Диссертацияда ұсынылған негізгі ғылыми нәтижелер, қағидалар мен қорытындылар автордың жеке өзімен алынған.

Зерттеу нәтижелерін апробациялау және енгізу.

Диссертациялық зерттеу нәтижелері «Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті» КеАҚ оқу үрдісіне 7М07102 – «Материалтану және жаңа материалдар технологиясы» білім беру бағдарламасының «Материалдардың беріктігін бағалаудың жаңа тәсілдері» пәнін оқыту барысында енгізілді, бұл оқу үрдісіне енгізу актісімен расталады.

Диссертациялық жұмыстың негізгі ғылыми нәтижелері отандық және шетелдік ғылыми басылымдарда жарияланған 17 еңбекте көрініс тапқан, оның ішінде:

– Scopus және Web of Science деректер базаларында индекстелетін халықаралық рецензияланатын ғылыми басылымдарда екі мақала жарияланған: Non-Ferrous Metals (Ресей Федерациясы, Scopus деректер базасы бойынша 41-процентиль) және Heat Transfer (АҚШ, Scopus деректер базасы бойынша 82-процентиль, Web of Science деректер базасының JCR Category бойынша 2-квартіліне (Q2) ие);

– ҚР ҒЖБМ Ғылым және жоғары білім сапасын қамтамасыз ету комитеті (ҒЖБССҚК) ұсынған басылымдар тізбесіне енгізілген ғылыми журналдарда жарияланған алты мақала: Engineering Journal of Satbayev University №2, Bulletin of the Karaganda University №4 (104), Kompleksnoe ispolzovanie mineralnogo syra №2, Bulletin of the Karaganda University №4 (108), Труды Университета №3 (88) және Наука и техника Казахстана №4;

– Зияткерлік меншік объектісіне 1 қорғау құжаты: № 59694 авторлық құқық туралы куәлік;

– сондай-ақ зерттеу нәтижелері автор тарапынан отандық және халықаралық ғылыми-практикалық конференцияларда жасалған сегіз баяндамада ұсынылған.

Диссертацияның құрылымы мен көлемі.

Диссертация кіріспеден, бес бөлімнен тұратын негізгі бөлімнен, қорытындыдан және қосымшалардан тұрады. Диссертация көлемі 166 бет машинкамен терілген мәтінді құрайды. Жұмыста 29 сурет, 39 кесте берілген. Пайдаланылған әдебиеттер тізімі 292 атауды қамтиды.