

## **АННОТАЦИЯ**

диссертации на соискание степени доктора философии PhD по направлению подготовки: 8D072 – «Производственные и обрабатывающие отрасли», образовательной программе: 8D07203 «Металлургия»

**БЕКБАЕВА ЛӘЗЗӘТ АҚЫЛБАЙҚЫЗЫ**

### **РАЗВИТИЕ КЛАСТЕРНО-АССОЦИАТНОЙ ТЕОРИИ ЖИДКОСТИ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВОВ СЛОЖНЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ И МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ**

**Актуальность диссертационной работы.** Необходимость исследования свойств веществ определяется как растущими потребностями техники, так и научным значением получаемых результатов. В этом смысле изучение свойств расплавов неорганических соединений, находящих все большее применение в современной технике, представляет значительный интерес. От физической природы различных неорганических соединений зависят особенности их исследования, как в теоретическом, так и в экспериментальном плане. За последние годы было проведено много исследований физико-химических и тепловых свойств расплавов неорганических соединений. Наряду с такими свойствами, как плотность, теплопроводность, теплоемкость, упругость насыщенного пара и т.д., первостепенное значение имеет и вязкость как параметр, определяющий гидродинамику и теплопередающие характеристики системы. Подробное и тщательное исследование вязкости расплавов сложных неорганических соединений и металлических сплавов представляет научный и практический интерес, так как именно вязкость является структурно-чувствительной характеристикой жидкости, которая позволяет оценить силы взаимодействия между частицами.

В настоящее время многие исследователи, изучая жидкое состояние, расплавы и сплавы, предпочитают использовать модели, основанные на концепции квазикристаллического описания. Это означает, что структура жидкости моделируется на основе реальных взаимодействий между частицами, которые проявляются в кристаллическом теле. Данный способ основан на единстве конденсированного состояния вещества и сил притяжения между частицами, которые действуют до и после точки плавления.

Методы расчета вязкости расплавов являются важным инструментом для понимания и изучения свойств этих веществ. Они основаны на различных модельных теориях, таких как дифракционные исследования, псевдопотенциальная теория, статистическая геометрия многогранников Вороного и т.п. Благодаря этим методам удалось собрать огромное количество экспериментальных данных о свойствах и структуре жидких металлов. Но, несмотря на значительный прогресс в этой области, все эти модели имеют свои ограничения и приближения, а также работают только в узком диапазоне

температур. Это приводит к тому, что данные о вязкости, полученные различными методами, могут значительно отличаться друг от друга (иногда более чем на порядок).

В связи с этим возникает необходимость в разработке альтернативных подходов к пониманию вязкости расплавов и более точно определять эту характеристику при различных условиях, применяя новые данные в различных металлургических процессах.

Данная диссертационная работа является продолжением развития концепции хаотизированных частиц, предложенной и обоснованной сотрудниками Химико-металлургического института им. Ж. Абишева и предназначена для его существенного дополнения и развития, поскольку относится к проблеме фундаментального обоснования теории строения и свойств расплавов и жидкого состояния в целом.

**Цель исследования** является модификация кластерно-ассоциатной теории жидкого состояния вещества применительно к расплавам неорганических веществ и металлических сплавов для описания и прогноза температурных зависимостей их вязкости.

**Объект исследования:** Справочные экспериментальные и сглаженные данные по вязкости расплавов неорганических соединений и металлических сплавов.

**Предмет исследования:** Температурная зависимость динамической вязкости расплавов сложных неорганических соединений и металлических сплавов.

**Задачи исследования.** В соответствии с указанной целью в диссертации решены следующие задачи:

1. Анализ современного состояния направления по строению и свойствам расплавов и жидкого состояния в целом. Анализ основных существующих расчетных зависимостей вязкости от температуры, выявление характера их приближения и источников ошибок.

2. Обосновать вероятностное определение и количественное выражение виртуальности образования и существования кластеров твердой фазы в жидкости как материального субстрата ее вязкости.

3. Применить кластерно-ассоциатную модель жидкости в комбинации с уравнением Френкеля для выражения температурной зависимости вязкости расплавов сложных (трех- и более атомных) неорганических веществ.

4. Применить кластерно-ассоциатную модель жидкости для выражения температурной зависимости вязкости металлических сплавов на основе их фазовых диаграмм состояния.

**Научная новизна:**

– использование единого показателя (степени агрегации и ассоциации кластеров) для создания обобщенной полуэмпирической модели вязкости применительно к расплавам неорганических соединений и металлическим сплавам;

– определение энергии активации вязкого течения для сложных неорганических соединений и металлических сплавов на основе модификации уравнения Френкеля;

– обоснование существования кластеров твердой фазы в жидкости и количественного выражения виртуальности образования кластеров из кристаллоподвижных частиц как материальной консистенции вязкости;

– впервые выявлена закономерная связь степени ассоциации кластеров с изменением периода системы элементов Д.И. Менделеева для сложных неорганических соединений, что в первом приближении подтверждает функциональный характер новой кластерно-ассоциатной модели.

Планируемые исследования характеризуются принципиальной новизной ввиду того, что жидкое состояние ранее рассматривалось только в рамках структурного подхода. Диссертационная работа целиком основана на раскрытии природы жидкого состояния через бесструктурную, хаотизированную составляющую вещества, которая раньше рассматривалась только как помеха структурной определенности жидкости. Новый подход позволил впервые разработать полностью согласованные характеристики вязкого состояния жидкости сложных веществ в полном диапазоне этого состояния.

#### **Практическая ценность работы.**

Изучение вязкости в металлургии имеет важную практическую значимость, поскольку позволяет более точно управлять процессами плавки, литья и рафинирования металлов. Знание вязкости расплавов позволяет прогнозировать их текучесть, обеспечить равномерное заполнение форм, повысить качество отливок и снизить количество брака. Кроме того, контроль вязкости шлаков и расплавов способствует более эффективному удалению примесей и улучшению теплообмена в плавильных агрегатах. Всё это напрямую отражается на стабильности производства, экономичности процессов и свойствах конечной продукции.

С практической точки зрения данные о вязкости имеют принципиальное значение при проектировании и оптимизации металлургических процессов. В процессах литья вязкость расплава определяет его жидкотекучесть, способность заполнять форму сложной конфигурации, формирование поверхностного слоя и вероятность образования дефектов, таких как усадочные раковины и газовая пористость. Недостаточный учет вязкостных характеристик может привести к неравномерному заполнению литейной формы и ухудшению качества отливок. В металлургических агрегатах (доменных, мартеновских, электрических печах) вязкость расплава влияет на процессы тепло- и массообмена, интенсивность перемешивания, скорость растворения легирующих элементов и эффективность рафинирования. Например, изменение вязкости шлака или металлического расплава существенно сказывается на кинетике химических реакций и разделения фаз «металл-шлак».

Практическая ценность работы заключается в разработке обобщенной полуэмпирической модели вязкости расплавов сложных неорганических

веществ, металлических сплавов и шлаковых систем, основанной на концепции хаотизированных частиц. В новой кластерно-ассоциатной модели используются новые параметры – степень ассоциации кластеров и степень агрегации ассоциатов. Полученные результаты позволяют проводить расчет вязкости расплавов в широком температурном интервале, включая область, близкую к температуре кипения, что существенно расширяет возможности прогнозирования их технологических свойств. Предложенный подход может быть использован при оптимизации процессов плавки, литья и рафинирования, а также при выборе рациональных технологических режимов металлургических агрегатов.

Установлена возможность использования ограниченного числа экспериментальных реперных точек для прогнозирования поведения расплавов во всем температурном диапазоне. На примере сплавов (в том числе системы Cu-Sn и Cu-Al) установлена количественная взаимосвязь между положением линии ликвидуса и долей кластеров в расплаве, что позволяет использовать фазовые диаграммы для расчета вязкостных характеристик и прогнозирования технологических свойств сплавов. Разработанная кластерно-ассоциатная модель уточнена с учетом термодинамических параметров (теплоты смешения и плавления компонентов), что позволило получить адекватное математическое описание вязкости на основе минимального набора исходных данных. Экспериментальная проверка новой модели на шлаковых системах (в том числе CaO-SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgO-MnO) показала высокую степень согласования расчетных и экспериментальных данных, что подтверждает возможность ее применения при моделировании реальных металлургических процессов. Полученные значения энергии активации вязкого течения позволяют использовать разработанный подход для количественной оценки кинетических параметров жидкофазных процессов.

Авторами концепции хаотизированных частиц в работе «Плавкость и пластичность металлов» были даны новые трактовки плавкости и пластичности металлов с обоснованием оптимальной зоны пластичности и температуры Бочвара-Таммана. Это позволило определить энергетический КПД прокатных станов и на основе кластерно-ассоциатной модели вязкости меди обеспечить получение медной катанки высшего качества в Жезказганском горно-металлургическом комбинате.

Результаты работы внедрены в учебный процесс и используются при преподавании дисциплины «Новые подходы к оценке прочности материалов», что способствует повышению качества подготовки специалистов в области металлургии.

**Положения, выносимые на защиту:**

- обоснование количественного выражения виртуальности образования и существования кластеров твердой фазы в жидкости как составляющих консистенцию вязкости;
- разработка теории вязкости и текучести расплавов на основе учета вкладов кристаллоподвижных, жидкоподвижных и пароподвижных

хаотизированных виртуальных частиц применительно к расплавам сложных неорганических веществ и металлических сплавов;

– кластерно-ассоциатные модели жидкости в комбинации с уравнением Френкеля для выражения температурной зависимости вязкости расплавов сложных (трех- и более атомных) неорганических веществ;

– обоснование взаимосвязи температурной зависимости вязкости сплава с их фазовой диаграммой состояния (на примере Cu-Sn);

– данные по энергии активации вязкого течения для сложных неорганических соединений и металлических сплавов на основе модификации уравнения Френкеля применительно к динамической вязкости.

**Место выполнения научно-исследовательской работы:** Карагандинский технический университет им. Абылкаса Сагинова (кафедра МНМ), Химико-металлургический институт им. Ж. Абишева.

**Выполнение диссертационной работы связано с реализацией** грантового проекта ИРН AP05130844 (2018-2020 гг.) «Разработать теорию вязкости и текучести расплавов на основе учета вкладов кристаллоподвижных, жидкоподвижных и пароподвижных хаотизированных виртуальных частиц применительно к расплавам неорганических веществ и металлическим сплавам». Диссертационное исследование является логическим продолжением данного проекта, в рамках которого были получены научные результаты, послужившие основой для дальнейшего развития исследований и разработки кластерно-ассоциатной модели вязкости расплавов сложных неорганических веществ и металлических сплавов.

#### **Личный вклад диссертанта**

Автором самостоятельно выполнены анализ научной литературы, обработка и систематизация экспериментальных данных по вязкости расплавов сложных неорганических соединений и металлических сплавов, модификация кластерно-ассоциатной модели жидкого состояния, разработка расчетных зависимостей, проведение вычислительных исследований и экспериментальных работ по проверке разработанной модели. Автором проведена экспериментальная проверка новой модели на шлаковых системах, в том числе системы  $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-MnO}$ , подтвердившая высокую степень согласования расчетных и экспериментальных данных.

Автор принимал непосредственное участие в анализе и интерпретации полученных результатов, подготовке научных статей и публикаций, а также апробации результатов исследования на научных конференциях и семинарах.

Основные научные результаты, положения и выводы, представленные в диссертации, получены автором лично.

#### **Апробация и внедрение результатов исследования.**

Результаты диссертационного исследования внедрены в учебный процесс НАО «Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова» при изучении дисциплины «Новые подходы к оценке прочности материалов» образовательной программы 7M07102 «Материаловедение и технология новых материалов», что подтверждается актом внедрения в учебный процесс.

Основные научные результаты диссертационной работы представлены в 17 публикациях в отечественных и зарубежных научных изданиях, в том числе:

- две статьи в международных рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science: Non-Ferrous Metals (Российская Федерация, процентиль 41 в базе Scopus) и Heat Transfer (США, процентиль 82 в базе Scopus, Q2 по JCR Category базы данных Web of Science);

- шесть статей в научных изданиях, входящих в перечень изданий, рекомендованных КОКСНВО МНВО РК – «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) и «Наука и техника Казахстана» №4;

- 1 охранный документ на объект интеллектуальной собственности: свидетельство об авторском праве № 59694;

- также результаты исследований были представлены автором в восьми докладах на отечественных и международных научно-практических конференциях.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, основной части, состоящей из 5 разделов, заключения и приложений. Объем диссертации составляет 166 страниц машинописного текста, работа содержит 29 рисунка, 39 таблицы, список использованных источников, включающий 292 наименований.