
ВЗАЄМОДІЯ ФАЗ

<https://doi.org/10.15407/plit2022.04.003>

УДК 621.746.58:669.33

Б. Ф. Бєлов, канд. техн. наук, пров. наук. співроб.; e-mail: brobigor@gmail.com

А. І. Троцан, д-р техн. наук, проф., гол. наук. співроб.;

e-mail: don1945@ukr.net

О. В. Власова, канд. техн. наук, старш. наук. співроб.;

e-mail: oksanavlasova@ukr.net

Інститут проблем матеріалознавства НАН України Київ (Київ, Україна)

АНАЛІЗ СТРУКТУРНО-ХІМІЧНОГО СТАНУ ДУПЛЕКС-СИСТЕМ СИЛІКАТИ-СИЛІЦИДИ ЛУЖНО-ЗЕМЕЛЬНИХ МЕТАЛІВ. Повідомлення 1.

Для подальшого розвитку структурно-хімічних засад процесів рафінування залізо-вуглецевих розплавів проведено класифікацію та структурування оксидних і металічних фаз бінарних дуплекс-систем силікати-силіциди лужноземельних металів, що дозволить визначати оптимальний склад сплавів ЛЗМ на основі кремнію при рафінуванні залізовуглецевих розплавів та модифікуванні неметалічних включень. Побудовано іонно-молекулярні комплекси магнію, кисню та кремнію, що визначають механізм утворення неметалічних включень (силікатів магнію) у сталі при використанні сплавів силікомагнію для рафінування. Визначені параметри хімічного зв'язку для оксидів з іонним типом зв'язку, для рідких сплавів силікомагнію, що мають металевий тип хімічного зв'язку та для твердих сплавів, що мають метало-ковалентний зв'язок. Побудовані полігональні діаграми систем $Mg-Si$ та $MgO-SiO_2$, встановлено послідовні ряди проміжних фаз для цих систем, а також структурні характеристики фаз. Визначені хімічні реакції утворення інтерметалідів в системі $Mg-Si$, їх стехіометричний склад, температури утворення та плавлення. Для сплавів силікомагнію визначено умовний марочний склад, що відповідає твердим розчинам змінного складу на основі інтерметалідів. Представлені результати структурно-хімічного аналізу дуплекс-системи $MgO-SiO_2-Mg-Si$ дозволяють розкрити механізми процесів десульфурації, визначити адсорбційну ємність щодо сірки оксисульфідних фаз, що утворюються при використанні сплавів силікомагнію, та розробити технології десульфурації доменного чавуну при виплавці та ковшовій обробці пічними (горновими) шлаками, магнієм та його сплавами з кремнієм.

Ключові слова: полігональна діаграма, оксиди магнію, силіциди лужноземельних металів, квантово-механічні параметри, класифікація та структурування.

Лужноземельні метали (ЛЗМ) II групи елементів таблиці Д. І. Менделєєва, яка відкривається верилієм (Be) і поділяється на підгрупи «s»-елементів, що мають різну фізичну та хімічну активність в процесах рафінування, мікролегування та модифікування залізо-вуглецевих розплавів та неметалічних включень [1].

Структурно-хімічний аналіз дуплекс-систем виконано за допомогою полігональних діаграм стану бінарних оксидних фаз (силікати ЛЗМ) та бінарних сплавів кремнію із ЛЗМ (силіциди ЛЗМ). Полігональні діаграми побудовані графо-аналітичним методом (ПДС-метод, [2]) у всьому інтервалі концентрації твердих та рідких вихідних компонентів. Геометричний образ полігональних діаграм (ПДС) залежить від первинної проміжної фази (ППФ), умови утворення якої – стехіометричний та хімічний склади, температури утворення та плавлення, область гомогенності твердих та рідких розчинів визначаються за критеріями феноменологічної теорії будови металургійних фаз (теорія МГС-фаз, [3]).

Теорія МГС-фаз, що включає радіально-орбітальну модель електронної будови атомів (модель РОМ-атом [4]) відповідно до квантового матеріалознавства [5] використовує квантово-механічні параметри (радіальні та орбітальні радіуси при заданій конфігурації зовнішніх електронів, енергію електронів та їх зв'язок з ядром атома) для розрахунку довжини та енергії для заданого типу хімічного зв'язку при побудові структурних іонно-молекулярних комплексів (СІМ-комплекси) рідких та твердих розчинів у вигляді полігональних (ПГК) та поліедричних (ПДК) комірок.

ПГК і ПДК для ППФ відрізняються від вторинних фаз мінімальною кількістю частинок (N) і максимальною щільністю їх упаковки, розрахованої з наведеної площі ПГК (S_0) або об'єму ПДК (V_0) по N . ППФ утворюються при будь-яких співвідношеннях концентрацій вихідних компонентів, тоді як вторинні фази утворюються залежно від співвідношення мас ППФ та вихідних компонентів.

СІМ-комплекси при стохастичному аналізі матеріального балансу структурно-хімічних реакцій розкривають механізм міжатомної взаємодії та ефективність процесів рафінування, мікролегування металевих та модифікування неметалічних фаз залізовуглецевих розплавів і модифікованих неметалічних включень.

Метою даної роботи є класифікація та структуризація оксидних і металічних фаз бінарних дуплекс-систем силікати-силіциди лужноземельних металів для визначення оптимального складу сплавів ЛЗМ на основі кремнію при рафінуванні залізовуглецевих розплавів та модифікуванні неметалічних включень.

Отримані результати досліджень є подальшим розвитком структурно-хімічних засад процесів рафінування залізо-вуглецевих розплавів [5] і подаються у наступних повідомленнях:

1. Силікати – силіциди магнію;
2. Силікати – силіциди кальцію;
3. Силікати – силіциди стронцію;
4. Силікати – силіциди барію;
5. Ефективність застосування сплавів ЛЗМ на основі кремнію для ковшової обробки сталі.

Повідомлення 1.

Дуплекс-система $MgO-SiO_2$: $Mg-Si$

Аналіз структурно-хімічного стану оксидних та металевих фаз дуплекс-системи виконано за допомогою полігональних діаграм стану силікатів магнію $MgO-SiO_2$ та сплавів силікомагнію $Mg-Si$.

1.1 Силікати магнію

Системним класифікатором силікатів магнію є полігональна діаграма $MgO-SiO_2$, що представлена на рис. 1.

ПДС $MgO-SiO_2$ включає послідовний ряд проміжних фаз: $MgO \rightarrow 4 MgO-SiO_2 \rightarrow 3MgOSiO_2 (E_1) \rightarrow 2MgOSiO_2 (ППФ) \rightarrow MgOSiO_2 \rightarrow 2MgO_3SiO_2 (E_2) \rightarrow MgO_2SiO_2 \rightarrow MgO_3SiO_2 (M_1) \rightarrow MgO_6SiO_2 (M) \rightarrow MgO_{24}SiO_2 (M_2) \rightarrow SiO_2$, що містить евтектичні (E_1 , E_2), монотектичні (M_1 , M , M_2) фази, енстатит, форстерит, а також купол незмішуваності у рідкому стані з критичною точкою при $2200^\circ C$ [7].

Критична точка купола незмішуваності відповідає стехіометричному складу силікату магнію MgO_6SiO_2 , що утворюється в рідкому стані при $1600^\circ C$ [8] і існує у трьох модифікаціях: поліедрична (L_m^{pd}), полігональна (L_m^{pr}) та розупорядкована

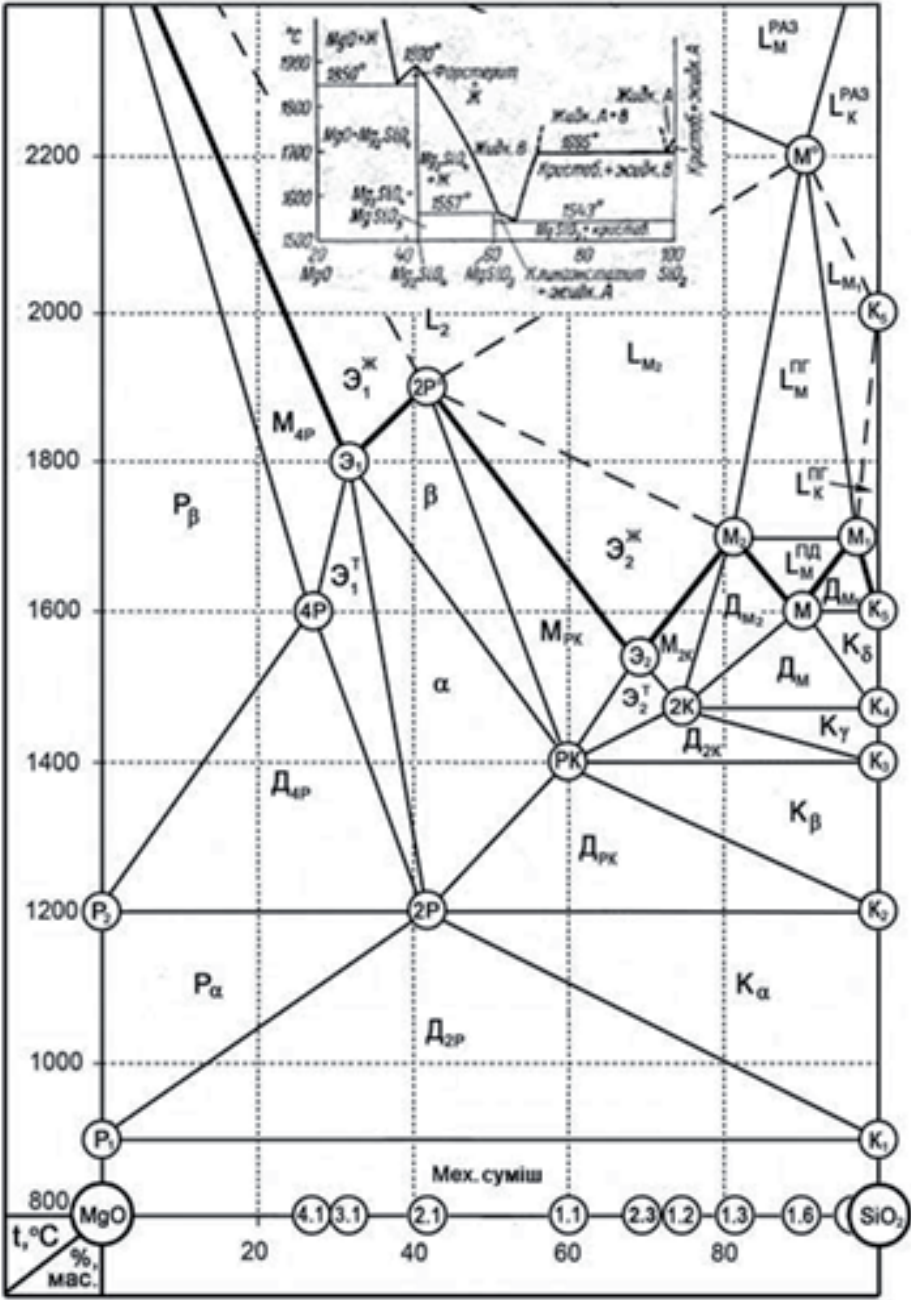


Рис. 1. Полігональна діаграма MgO-SiO_2 (вставка [7])

($L_m^{\text{раз}}$). Купол незмішуваності обмежують дві рідини (L_{m1}) на базі монотектичної фази $\text{MgO}3\text{SiO}_2$ та (L_{m2}) на базі $\text{MgO}24\text{SiO}_2$. Лінія ліквідус (жирна лінія) проходить через сингулярні точки: P_2 (температура плавлення периклазу – MgO) $\rightarrow E_1 \rightarrow 2P \rightarrow E_2 \rightarrow M_2 \rightarrow M \rightarrow M_1 \rightarrow K_5$. На класичній діаграмі (вставка на рис. 1) існують дві евтектики – форстерит (2MgOSiO_2) і енстатит (MgOSiO_2).

Класифікацію силікатів магнію представлено в табл. 1, що містить стехіометричний та хімічний склади, умовні позначення, температури утворення та плавлення. Форстерит плавиться конгруентно при 1900 °С та існує в рідкому стані (L_{2p}), енстатит (РК) плавиться інконгруентно в інтервалі 1550–1900 °С, евтектичні точки при температурах 1800 °С (E_1) та 1550 °С (E_2)

Таблиця 1

Класифікація силікатів магнію

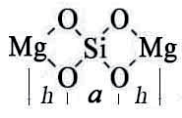
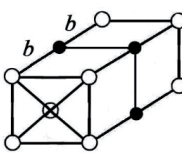
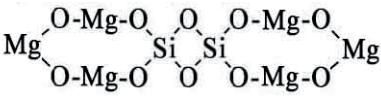
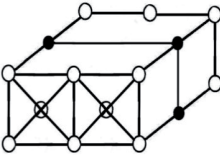
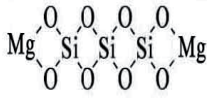
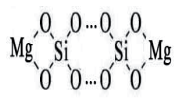
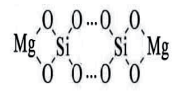
Лінійні системи	Проміжні фази						
	хімічні реакції	стехіометричний склад	умовні позначення	SiO ₂ , %мас.	MgO SiO ₂	*) Температура, °C	
						утворення	плавлення
MgO – SiO ₂	$2\text{MgO} + \text{SiO}_2 \leftrightarrow 2\text{MgOSiO}_2$ $4(2\text{MgOSiO}_2) \leftrightarrow 3\text{MgOSiO}_2 + \text{MgOSiO}_2$	2MgOSiO ₂ (Форстерит)	2.1(2P)	42,9	1,33	$\frac{1200}{\text{н.д.}}$	$\frac{1900}{1900}$
MgO – –2MgOSiO ₂	$2\text{MgO} + 2\text{MgOSiO}_2 \leftrightarrow 4\text{MgOSiO}_2$	4MgOSiO ₂	4.1(4P)	27,3	2,67	$\frac{1600}{\text{н.д.}}$	$\frac{-}{\text{н.д.}}$
2MgOSiO ₂ – 4MgOSiO ₂	$2\text{MgOSiO}_2 + 4\text{MgOSiO}_2 \leftrightarrow 2(3\text{MgO-SiO}_2)$	3MgOSiO ₂	3.1(Э ₁)	33,3	2,0	$\frac{1800}{1850}$	$\frac{1800}{1850}$
SiO ₂ – –2MgOSiO ₂	$\text{SiO}_2 + 2\text{MgOSiO}_2 \leftrightarrow 2(\text{MgOSiO}_2)$	MgOSiO ₂ (Энстатит)	1.1(ПК)	60,0	0,67	$\frac{1400}{\text{н.д.}}$	$\frac{-}{1557}$
SiO ₂ – MgOSiO ₂	$\text{SiO}_2 + \text{MgOSiO}_2 \leftrightarrow \text{MgO}_2\text{SiO}_2$	MgO ₂ SiO ₂	1.2(2К)	75,0	0,33	$\frac{1475}{\text{н.д.}}$	$\frac{-}{\text{н.д.}}$
MgOSiO ₂ – MgO ₂ SiO ₂	$\text{MgOSiO}_2 + \text{MgO}_2\text{SiO}_2 \leftrightarrow 2\text{MgO}_3\text{SiO}_2$	2MgO ₃ SiO ₂	2.3(Э ₂)	30,8	0,45	$\frac{1550}{1543}$	$\frac{1550}{1543}$
SiO ₂ – MgO ₂ SiO ₂	$4\text{SiO}_2 + \text{MgO}_2\text{SiO}_2 \leftrightarrow \text{MgO}_6\text{SiO}_2$ $7(\text{MgO}_6\text{SiO}_2) \leftrightarrow \text{MgO}_{24}\text{SiO}_2 + 6(\text{MgO}_3\text{SiO}_2)$	MgO ₆ SiO ₂	1.6 (M)	90,0	0,11	$\frac{1600}{\text{н.д.}}$	$\frac{1600}{\text{н.д.}}$
MgO ₂ SiO ₂ – MgO ₆ SiO ₂	$3(\text{MgO}_2\text{SiO}_2) + \text{MgO}_6\text{SiO}_2 \leftrightarrow 4(\text{MgO-3SiO}_2)$	MgO ₃ SiO ₂	1.3 (M ₂)	81,8	0,22	$\frac{1700}{\text{н.д.}}$	$\frac{1700}{\text{н.д.}}$
SiO ₂ – MgO ₆ SiO ₂	$18\text{SiO}_2 + \text{MgO}_6\text{SiO}_2 \leftrightarrow \text{MgO}_{24}\text{SiO}_2$	MgO ₂₄ SiO ₂	1.24 (M ₁)	97,2	0,02	$\frac{1700}{\text{н.д.}}$	$\frac{1700}{\text{н.д.}}$

Примітка: н.д. – немає даних, . . – інконгруентне плавлення, *): чисельник – дослідження, знаменник – довідкові дані [7].

Проміжні фази в області гомогенності є моно- або двоструктурними вище (М) або нижче (Д) температур їх утворення: М – неперервний, Д – періодичний тверді розчини змінного складу.

Таблиця 2

Структуризація силікатів магнію

№ п/н	Формульний склад		СІМ-комплекси
	стехіометричний	структурний)	полігональна / поліедрична комірка
			$a = 0,20$ нм, $b = 0,15$ нм, $h = 0,106$ нм.
1	2MgOSiO_2 (ППФ)	ПГК Mg_2SiO_4	 $N = 7, S_0 = 0,0118$
		ПДК $\text{Mg}_4\text{Si}_2\text{O}_8$	 $N = 14, V_0 = 0,0009$
2	3MgOSiO_2 (Э ₁)	ПГК $\text{Mg}_6\text{Si}_2\text{O}_{10}$	 $N = 18, S_0 = 0,0135$
3	MgOSiO_2	ПДК $\text{Mg}_4\text{Si}_4\text{O}_{12}$	 $N = 20, V_0 = 0,0012$
4	$2\text{MgO}_3\text{SiO}_2$ (Э ₂)	ПГК $\text{Mg}_2\text{Si}_3\text{O}_8$	 $N = 13, S_0 = 0,0125$
6	MgO_3SiO_2	ПГК $\text{Mg}_2\text{Si}_6\text{O}_{14}$	 $N = 22, S_0 = 0,0128$
7	MgO_6SiO_2	ПГК $\text{Mg}_2\text{Si}_{12}\text{O}_{26}$	 $N = 40, S_0 = 0,0131$

*) – ПГК – полігональні комірки, ПДК – поліедричні комірки;
о – кисень, ⊗ – кремній, ● – магній

У табл. 2 наведено структуризацію силікатів магнію. Первинна проміжна фаза (ППФ) відповідає складу форстериту, що утворюється в твердому стані з поліедричною коміркою (ПДК) з 14 частинок і відносною щільністю упаковки $\text{MgO} = 0,0009$. У рідкому стані форстерит утворює ПГК із 7 частинок та щільністю упаковки $S_0 = 0,0118$. Область гомогенності твердих розчинів форстериту при температурах $1400\text{--}1800^\circ\text{C}$ існує в межах $33,3\text{--}60,0\%$ SiO_2 . У рідкому стані форстерит є розчином змінного складу в інтервалі температур $2200\text{--}2800^\circ\text{C}$ при вмісті MgO від $10,0$ до $100,0\%$.

Взаємодія фаз

Вторинні фази утворюються в твердому – енстатит з ПДК з 20 частинок і $V_0 = 0,0012$, евтектичні та монотектичні фази утворюються та існують у рідкому стані з менш щільною упаковкою.

1.2. Сплави силікомагнію

Системним класифікатором сплавів силікомагнію є полігональна діаграма стану бінарної системи магній–кремній, що представлена на рис. 2.

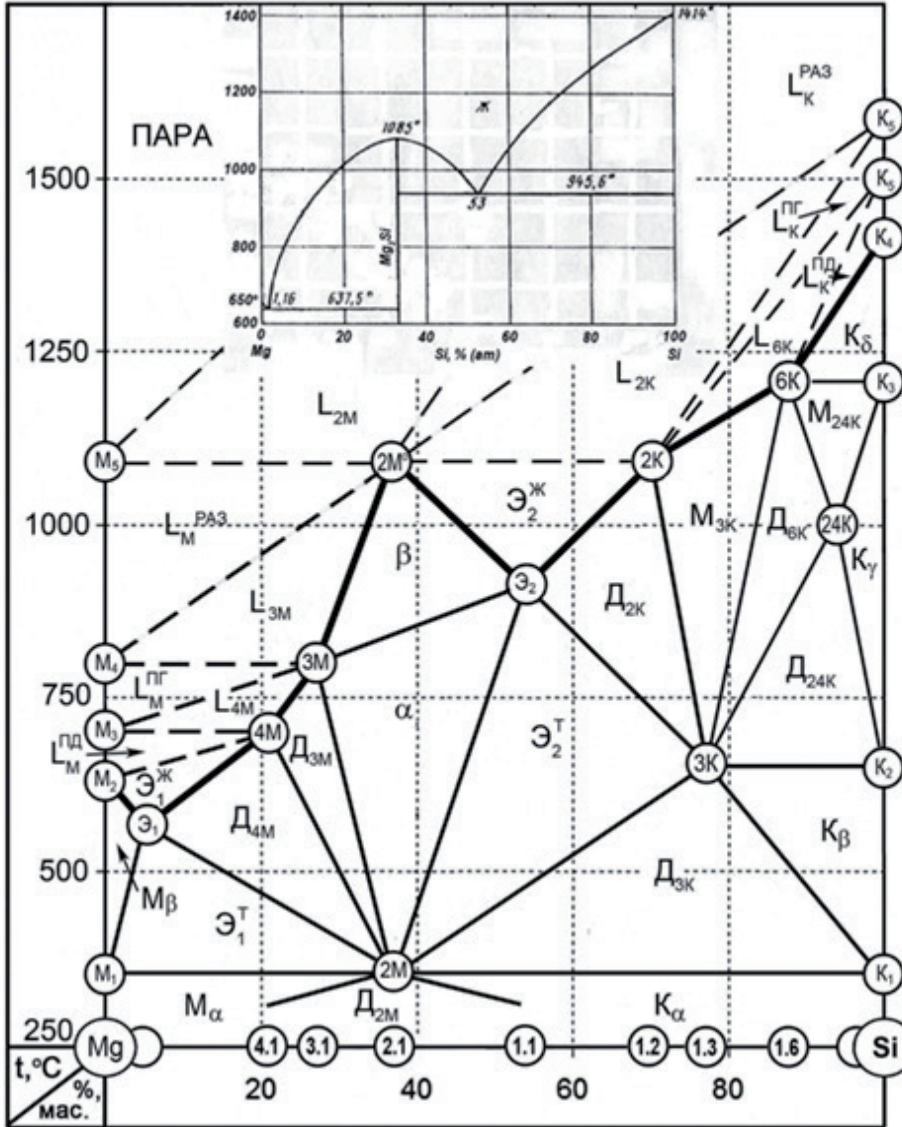


Рис. 2. Полігональна діаграма сплавів силікомагнію (вставка [9])

ПДС Mg–Si включає послідовний ряд 9 проміжних фаз – інтерметалідів $Mg \rightarrow Mg_{24}Si (E_1) \rightarrow Mg_4Si \rightarrow Mg_3Si \rightarrow Mg_2Si (ППФ) \rightarrow MgSi (\Xi_2) \rightarrow MgSi_2 \rightarrow MgSi_3 \rightarrow MgSi_6 \rightarrow Mg_2Si_{24}$. На класичній діаграмі (вставка на рис. 2 [9]) існують інтерметалід та дві евтектики.

У табл. 3 наведено класифікацію сплавів силікомагнію, що включає хімічні реакції утворення інтерметалідів у лінійних системах, стехіометричний та хімічний склади, температури утворення та плавлення, а також умовний марочний склад сплавів (Si–кремній, Mg–магній), який відповідає твердим розчинам змінного складу на основі інтерметалідів.

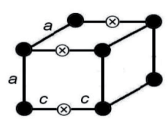
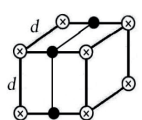
У табл. 4 представлено структуру інтерметалідів. Первинною фазою є Mg_2Si ,

Таблиця 3
Класифікація сплавів силікомагнію

Лінійні системи	Проміжні фази						
	хімічні реакції	стехіометричний склад	умовні позначення	Si %мас.	Si/Mg	*) Температура, °C	
						утворення	плавлення
Mg-Si	$2\text{Mg} + \text{Si} \leftrightarrow \text{Mg}_2\text{Si}$ $3(\text{Mg}_2\text{Si}) \leftrightarrow 2(\text{MgSi}) + \text{Mg}_4\text{Si}$	Mg_2Si	2.1	36,8	0,58	$\frac{350}{\text{н.д.}}$	$\frac{1100}{1100}$ C35Mg65
Mg-Mg ₂ Si	$22\text{Mg} + \text{Mg}_2\text{Si} \leftrightarrow \text{Mg}_{24}\text{Si}$	Mg_{24}Si	24.1 (Э ₁)	4,6	0,05	$\frac{600}{650}$	$\frac{600}{650}$ C5Mg95
Mg ₂ Si-Mg ₂₄ Si	$10(\text{Mg}_2\text{Si}) + \text{Mg}_{24}\text{Si} \leftrightarrow 11(\text{Mg}_4\text{Si})$	Mg_4Si	4.1	22,6	0,29	$\frac{700}{\text{н.д.}}$	$\frac{700}{\text{н.д.}}$ C25Mg75
Mg ₂ Si-Mg ₄ Si	$\text{Mg}_2\text{Si} + \text{Mg}_4\text{Si} \leftrightarrow 2(\text{Mg}_3\text{Si})$	Mg_3Si	3.1	28,0	0,39	$\frac{800}{\text{н.д.}}$	$\frac{800}{\text{н.д.}}$ C30Mg70
MgSi ₂ -Si	$\text{Mg}_2\text{Si} + 3\text{Si} \leftrightarrow \text{MgSi}_2$	MgSi_3	1.3	77,8	0,29	$\frac{650}{\text{н.д.}}$	$\frac{650}{\text{н.д.}}$ C80Mg20
Mg ₂ Si-MgSi ₃	$2(\text{Mg}_2\text{Si}) + \text{MgSi}_2 \leftrightarrow 5(\text{MgSi})$	MgSi	1.1 (Э ₂)	53,8	1,17	$\frac{900}{950}$	$\frac{900}{950}$ C55Mg45
Si-MgSi ₃	$21\text{Si} + \text{MgSi}_3 \leftrightarrow \text{MgSi}_{24}$	MgSi_{24}	1.24	96,6	0,04	$\frac{1000}{\text{н.д.}}$	$\frac{1000}{\text{н.д.}}$ C95Mg5
MgSi ₃ -MgSi ₂₄	$6(\text{MgSi}_3) + \text{MgSi}_{24} \leftrightarrow 7(\text{MgSi}_6)$	MgSi_6	1.6	87,5	0,14	$\frac{1200}{\text{н.д.}}$	$\frac{1200}{\text{н.д.}}$ C90Mg10
MgSi-MgSi ₃	$\text{MgSi} + \text{MgSi}_3 \leftrightarrow 2(\text{MgSi}_2)$	MgSi_2	1.2	70,0	2,33	$\frac{1100}{\text{н.д.}}$	$\frac{1100}{\text{н.д.}}$ C70Mg30

Примітка: н.д. – немає даних, . . . – інконгруентне плавлення, С – кремній, Мг – магній; *): чисельник – дослідження, знаменник – довідкові дані [9].

Структуризація сплавів силікомагнію

№ п/п	Формульний склад		СІМ - комплекси
	стехіометричний	структурний)	полігональна /поліедрична комірка
			$a = 0,08$ нм, $b = 0,091$ нм, $c = 0,182$ нм, $b = 0,204$ нм, $k = 0,102$ нм.
1	Mg_2Si (ППФ)	ПГК Mg_4Si_2	$\begin{array}{c} \quad b \quad \quad b \quad \\ -Mg \cdot Si \cdot Mg \\ a \\ -Mg \cdot Si \cdot Mg \end{array}$ $N=6, S_0=0,0024$
		ПДК Mg_8Si_4	$N=12$  $V_0=0,0002$
2	Mg_4Si	ПГК Mg_8Si_2	$\begin{array}{c} Mg \cdot Mg \cdot Mg \cdot Mg \\ Si \quad \quad Si \\ Mg \cdot Mg \cdot Mg \cdot Mg \end{array}$ $N=10, S_0=0,0087$
3	$MgSi$ (Θ_2)	ПГК Mg_4Si_4	$\begin{array}{c} Mg \cdot Si \cdot Mg \\ Si \quad Si \\ Mg \cdot Si \cdot Mg \end{array}$ $N=8, S_0=0,0041$
4	$MgSi_2$	ПДК Mg_4Si_8	 $N=12,$ $V_0=0,0124$
6	$MgSi_3$	ПГК Mg_2Si_6	$\begin{array}{c} Si \cdot Si \cdot Si \\ Mg \quad Mg \\ Si \cdot Si \cdot Si \\ \quad k \quad \quad k \quad \end{array}$ $N=8, S_0=0,0046$
7	$MgSi_6$	ПГК Mg_2Si_{12}	$\begin{array}{c} Si \cdot Si \cdot Si \cdot Si \cdot Si \cdot Si \\ Mg \quad \quad Mg \\ Si \cdot Si \cdot Si \cdot Si \cdot Si \cdot Si \end{array}$ $N=14, S_0=0,0056$

*) ПГК, ПДК – полігональна и поліедрична комірки: $\otimes$ – кремній, $\bullet$ – магній
 S_0, V_0 – щільність упаковки ПГК и ПДК

що утворює СІМ-комплекси з мінімальною кількістю частинок $N=6$ для ПГК та $N=12$ для ПДК та максимально щільною упаковкою $S_0=0,0020$ для ПГК та $V_0=0,0002$ для ПДК.

Геометричні параметри СІМ-комплексів розраховані за квантово-механічними параметрами атомів магнію та кремнію для заданого типу хімічного зв'язку. На відміну від оксидних фаз, що мають іонний тип хімічного зв'язку, інтерметаліди характеризуються метало-ковалентним типом хімічного зв'язку. Металевий зв'язок характерний для атомів магнію, а ковалентний для кремнію. У рідкому стані сплави мають лише металевий тип зв'язку $Mg-Mg$, $Si-Si$ і $Mg-Si$, бо кремній за нормальної температури $1200^\circ C$ стає металевим провідником [10, 11]. У твердих сплавах силікомагнію металевий зв'язок зберігається тільки для магнію, тоді як зв'язок $Si-Si$ та $Mg-Si$ залишається ковалентним.

Довжина хімічного зв'язку (ДЗ, нм) є основним параметром, що визначає

термодинамічну стабільність неметалевих та металевих фаз. ДЗ розраховується з рівнянь квантової механіки для заданого типу зв'язку [4]. Металічний зв'язок для атомів магнію складає $DZ_{мет} = 2 R_{Mg}^o = 0,080$ нм, для кремнію $DZ_{мет} = 2 R_{Si}^o = 0,102$ нм, для магнію-кремнію $DZ_{мет} = K_{Mg}^o + R_{Si}^o = 0,091$ нм $R_{Mg}^o + R_{Si}^o = 0,091$ нм Ковалентний зв'язок для кремнію становить $DZ_{ков} = 4 R_{Si}^o = 0,204$ нм, для магній-кремній $DZ_{ков} = 2 (R_{Mg}^o + R_{Si}^o) = 0,182$ нм.

Представлені результати структурно-хімічного аналізу дуплекс-системи $MgO-SiO_2-Mg-Si$ є науковою основою для розробки механізмів та технологій десульфурації доменного чавуну при виплавці та ковшовій обробці пічними (горновими) шлаками, магнієм та його сплавами з кремнієм. Результати розробки такої технології будуть представлені у наступному повідомленні.

Висновки

1. Побудовані полігональні діаграми дуплекс-системи $MgO-SiO_2::Mg-Si$, які мають високу інформативність та дозволяють виконати класифікацію та структурування оксидних та металевих фаз.

2. Побудовано іонно-молекулярні комплекси з урахуванням квантово-механічних параметрів магнію, кисню та кремнію, що визначають механізм утворення неметалічних включень (силікатів магнію) у сталі при використанні сплавів силікомагнію.

3. Визначено параметри хімічного зв'язку (довжина хімічного зв'язку – ДЗ, нм) для оксидів з іонним типом зв'язку: 0,14 (Si/O) та 0,15 (Mg/O), для рідких сплавів силікомагнію, що мають металевий тип хімічного зв'язку: 0,102 (Si/Si), 0,08 (Mg/Mg), 0,091 (Mg/Si) та для твердих сплавів, що мають метало-ковалентний зв'язок: 0,204 (Si/Si), 0,182 (Mg/Si).

Список літератури

- 1 Белов Б. Ф., Бакин И. К., Рябчиков И. В. и др. Анализ структурно-химического состояния элементов II группы периодической таблицы Д. И. Менделеева. *Сталь*. 2018. №11. С. 14–17.
- 2 Белов Б. Ф., Троцан А. И., Харлашин П. С., Крейденко Ф. С. Методика построения полигональных диаграмм состояния бинарных металлургических систем / Свідोцтво прав автора на твір. ПА № 2825 від 14.03.2000.
- 3 Белов Б. Ф., Троцан А. И., Харлашин П. С. Структуризация металлургических фаз в жидком и твердом состояниях. *Изв. ВУЗов. ЧМ*. 2002. № 4. С. 70–75.
- 4 Троцан А. И., Белов Б. Ф., Харлашин П. С. О природе химической связи элементов в металлургических фазах. *Изв. ВУЗов, ЧМ*. 2002. № 4. С. 60–64.
- 5 Будущее металлургии - за квантовым материаловедением. *Сталь*. 2007. № 7. С. 115.
- 6 Белов Б. Ф., Троцан А. И., Карликова Я. П. Структурно-химические основы процессов рафинирования железо-углеродистых расплавов. Мариуроль: ПГТУ, 2018, 184 с.
- 7 Атлас шлаков. Справочник, (пер. с нем.) / М.: Металлургия. 1985. 208 с.
- 8 Таблицы физических величин. Справочник. Под ред. Акад. И. К. Кикоина. М.: Атомиздат. 1976. 1008 С.
- 9 Хансен М., Андерко К. М. Структура двойных сплавов. М: Металлургиздат, 1962. т. 2. 1488 с.
- 10 Куцова В. З., Узлов К. И. Структурные превращения в кремнии и их влияние на кристаллизацию силуминов. Теория и практика металлургии, 1997. № 2. С. 19–23.
- 11 Туровский Б. М., Иванова И. И. Исследование температурной зависимости вязкости расплавленного кремния. *Изв. АН СССР. Неорганические материалы*, 1974. № 12. С. 2108–2111.

Надійшла 14.10.2022

References

- 1 Belov B. F., Bakin I. K., Ryabchikov I. V. et al. (2018) Analysis of the structural-chemical state of elements of group II of the periodic table of D. I. Mendeleev. *Steel*. No 11, pp. 14–17. [in russian].

- 2 Belov B. F., Trotsan A. I., Kharlashin P. S., Kreidenko F. S. (2000) Technique for constructing polygonal state diagrams of binary metallurgical systems. Certificate of the author's rights to TV. PA No. 2825 dated 14.03.2000. [in russian].
- 3 Belov B. F., Trotsan A. I., Kharlashin P. S. (2002) Structurization of metallurgical phases in liquid and solid states. *Izv.VUZov. Ch.M. No. 4. P. 70–75.* [in russian].
- 4 Trotsan A. I., Belov B. F., Kharlashin P. S. (2002) On the nature of chemical bonding of elements in metallurgical phases. *Izv. Universities, World Cup. No. 4, pp. 60–64.* [in russian].
- 5 The future of metallurgy lies with quantum materials science. *Steel. 2007. No. 7, pp. 115.* [in russian].
- 6 Belov B. F., Trotsan A. I., Karlikova Ya.P. (2018) Structural and chemical bases of iron-carbon melt refining processes. *Mariuroi: PSTU. 184 p.* [in russian].
- 7 Atlas of slags. Handbook, (translated from German). M.: Metallurgy. 1985. 208 p. [in russian].
- 8 Tables of physical quantities. Directory. Ed. By Acad. I. K. Kikoin. M.: Atomizdat. 1976. 1008 p. [in russian].
- 9 Hansen M., Anderko K. M. (1962) Structure of double alloys. M: Metallurgizdat. v. 2. 1488 p. [in russian].
- 10 Kutsova V. Z., Knots K. I. (1997) Structural transformations in silicon and their influence on the crystallization of silumins. *Theory and practice of metallurgy. No. 2, pp. 19–23.* [in russian].
- 11 Turovsky B.M., Ivanova I. I. (1974) Investigation of the temperature dependence of the viscosity of molten silicon. *Izv. Academy of Sciences of the USSR. Inorganic materials. No. 12, pp. 2108–2111.* [in russian].

Received 14.10.2022

B. F. Belov, *PhD (Engin.), Senior Research Scientist; e-mail: brobigor@maol.com*

A. I. Trotsan, *Dr. Sci. (Engin.), Prof., e-mail: don1945@ukr.net*

O. V. Vlasova, *PhD. Sci. (Engin.), e-mail: oksanavlasova@ukr.net*

Institute for Problem of Materials Science National Academy of Science of Ukraine (Kyiv, Ukraine)

THE ANALYSIS OF STRUCTURE-CHEMICAL STATE OF DUPLEX SYSTEM OF SILICATES-SILICIDES OF ALKALINE EARTH METALS

The classification and structuring of oxide and metallic phases of binary duplex systems of silicates-silicides of alkaline earth metals are carried out in the work. This will determine the optimal composition of alkaline earth metal alloys based on silicon in the refining of ferrocarbon melts and modification of non-metallic inclusions. The ionic-molecular complexes of magnesium, oxygen and silicon are constructed in the work, which determine the mechanism of formation of non-metallic inclusions (magnesium silicates) in steel when using silicomagnesium alloys for refining. The parameters of chemical bonding for oxides with ionic bond type, for liquid silicomagnesium alloys having a metallic type of chemical bonding and for hard alloys with metal-covalent bond are determined. The presented results of structural and chemical analysis of the duplex system $MgO-SiO_2-Mg-Si$ allow to reveal the mechanisms of desulfurization processes and to develop technologies of blast furnace desulfurization in smelting and ladle treatment with furnace slag, magnesium and its alloys with silicon.

Keywords: *polygonal diagram, magnesium oxides, alkaline earth metal silicides, quantum mechanical parameters, classification and structuring.*