

УДК 669.14.046.586.017.11

А.В. Балашов (5 курс, каф. СиС), А.А. Казаков, д.т.н., проф.

CaO-SiO₂ – КАК ОСНОВА ШЛАКОВ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО ПРОИЗВОДСТВА

Для построения диаграммы состояния CaO-SiO₂ использовалось коммерческое программное обеспечение ChemSage 4.1 и базы термодинамических данных SGTE (научная группа европейских термодинамических данных). Эти базы данных начали собираться и обобщаться группой европейских учёных еще 20 лет назад и продолжают уточняться до сих пор. Программа ChemSage обеспечивает доступ к этим базам данных и поиск глобального минимума энергии Гиббса, выраженной соответствующими уравнениями теории растворов.

В настоящем исследовании использовали модель ионного раствора, описывающую смешение в двух различных субрешетках. Шлак представляется в виде двух-субрешеточного ионного раствора (y_i^1, y_j^2 – доли подрешеточных компонентов i в подрешетке 1 или j в подрешетке 2). Катионы и анионы шлака принимаются, как независимые смеси.

Энергия Гиббса рассчитывается по уравнению:

$$G_m^{\varphi} = \sum_{i=1}^{m_1} y_i^1 y_j^2 G_{ij}^0 + RT \left(P \sum_{i=1}^{m_1} y_i^1 \ln y_i^1 + Q \sum_{j=1}^{m_2} y_j^2 \ln y_j^2 \right) + \sum_{i=1}^{m_1} \sum_{j < k} y_i^1 y_j^2 y_k^2 L_{jk}^i + \sum_{i=1}^{m_1} \sum_{j < l} y_i^1 y_j^2 y_l^2 L_{jl}^i$$

$$+ \sum_{i < j} \sum_{k=1}^{m_2} y_i^1 y_j^1 y_k^2 L_{ij}^k + \sum_{i < j < k} \sum_{l=1}^{m_2} y_i^1 y_j^1 y_k^1 y_l^2 L_{ijk}^l + \sum_{i < j} \sum_{k < l} y_i^1 y_j^1 y_k^2 y_l^2 L_{kl}^{ij}$$

Например, энергия Гиббса для жидкой фазы, состоящей из SiO₂ и CaO:

$$G_m^{liq} = y_{Si^{4+}}^1 y_{O_2^-}^2 G_{SiO_2}^0 + y_{Si^{4+}}^1 y_{O_2^-}^2 G_{SiO_2}^0 + y_{Ca^{2+}}^1 y_{O_2^-}^2 G_{CaO}^0 + y_{Ca^{2+}}^1 y_{O_2^-}^2 G_{CaO}^0 + RT \left[P \left(y_{Si^{4+}}^1 \ln(y_{Si^{4+}}^1) + y_{Ca^{2+}}^1 \ln(y_{Ca^{2+}}^1) \right) \right.$$

$$\left. + Q \left(y_{O_2^-}^2 \ln(y_{O_2^-}^2) + y_{O_2^-}^2 \ln(y_{O_2^-}^2) \right) \right] + y_{Si^{4+}}^1 y_{O_2^-}^2 y_{O_2^-}^2 L_{O_2^- O_2^-}^{Si^{4+}} + y_{Ca^{2+}}^1 y_{O_2^-}^2 y_{O_2^-}^2 L_{O_2^- O_2^-}^{Ca^{2+}} + y_{Si^{4+}}^1 y_{Ca^{2+}}^1 y_{O_2^-}^2 L_{Si^{4+} Ca^{2+}}^{O_2^-}$$

$$+ y_{Si^{4+}}^1 y_{Ca^{2+}}^1 y_{O_2^-}^2 L_{Si^{4+} Ca^{2+}}^{O_2^-} + y_{Si^{4+}}^1 y_{Ca^{2+}}^1 y_{O_2^-}^2 y_{O_2^-}^2 L_{Si^{4+} Ca^{2+}}^{O_2^- O_2^-} + y_{Si^{4+}}^1 y_{Ca^{2+}}^1 y_{O_2^-}^2 y_{O_2^-}^2 L_{O_2^- O_2^-}^{Si^{4+} Ca^{2+}}$$

Остальные фазы рассчитываются аналогично.

Результаты расчетов представлены на рис.1. Как следует из рис.1, на диаграмме состояния CaO-SiO₂ имеются три двойные эвтектики:

1. CaO-2CaO·SiO₂ с температурой 2030°C, (CaO-ортосиликат),
2. 3CaO·2SiO₂-CaO·SiO₂ с температурой 1460°C, (пиросиликат-волластонит),
3. CaO·SiO₂-SiO₂ с температурой 1440°C, (волластонит-тридимит);

два ингруэнтно плавящихся соединения:

1. 3CaO·2SiO₂ (пиросиликат), устойчивое до температуры 1460°C,
2. 3CaO·SiO₂ (алит), устойчивое в интервале температур 1250-2150°C

и два конгруэнтно плавящихся соединения:

1. α-2CaO·SiO₂ при температуре 2130°C,
2. CaO·SiO₂ (псевдо-волластонит) при температуре 1540°C.

Таким образом, диаграмма, построенная методом термодинамического моделирования, адекватно отражает превращения в системе CaO-SiO₂, так как она обобщает экспериментальные результаты многих исследований, известных к настоящему времени, и может быть использована для практических целей.

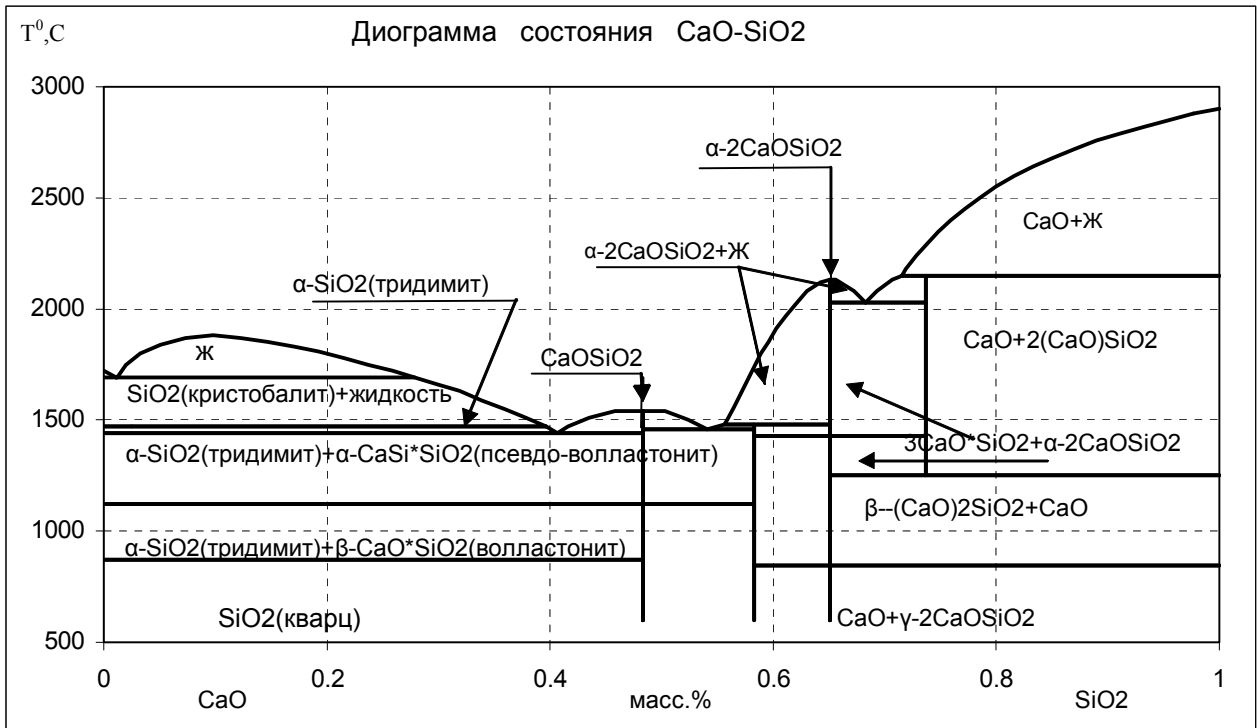


Рис. 1