

FactSage 在钢渣处理研究中的应用

韩霄, 曹颖川, 景东荣, 吴长松, 马良富, 韦家川, 陈宇红, 蒋亮

(北方民族大学材料科学与工程学院, 宁夏 银川 750021)

摘要: 介绍了目前 FactSage 在国内外钢渣处理中的应用进展, 并将 FactSage 应用于宁夏钢铁集团转炉钢渣的复杂多元多相平衡计算。结果表明, 该软件体系能够对钢渣体系进行较好地模拟计算, 但模拟结果应结合 SEM、EDS、XRD 等检测手段。借助 FactSage 能够预测温度、压力、成分等对整个钢渣体系的影响, 并对平衡状态下的各相组成进行模拟计算, 以此对整个体系进行优化设计。该软件系统在钢渣处理研究中具有良好的应用前景。

关键词: 钢渣; 矿物相; FactSage; 应用; CALPHAD

doi:10.3969/j.issn.1000-6532.2019.03.023

中图分类号: TD989

文献标志码: A

文章编号: 1000-6532 (2019) 03-0102-06

钢渣是炼钢过程中生成的固体废弃物, 其产生量随着钢产量的增长而迅速增长。经过长期的发展, 已经相继开发了多种转炉钢渣资源化再利用的途径, 主要包括回收钢渣中的有价值组分、钢渣在道路工程、环境工程、装饰工程中的应用以及在化学领域、农业领域、建筑领域和冶金领域中的再利用。传统的用于表征钢渣后续处理的行为方法正在遇到各种问题, 对于钢渣后续处理中各化合物的性质难以进行准确的预测。而随着钢渣相图模型和化学热力学方面的提高, 计算方法、计算软件和硬件的进步, 已经使得热力学软件能够准确预测复杂多相钢渣系统的相平衡条件。通过计算机辅助热力学分析在加强钢渣综合利用的研究中的进一步应用, 能够开发钢渣利用新途径, 提高钢渣再利用率及产品附加值^[1-3]。

1 CALPHAD 方法及其应用

1970 年, Kaufman 提出了 CALPHAD 技术, 即相图热力学计算, 它是目前利用试验相图和其

它所有热力学试验信息建立现代相图最成熟的一种技术^[4]。Bale 和 Eriksson 提出了集成热化学数据库的概念, 其特点是热化学数据库不仅包括了经过热力学优化评估具有自洽性的热力学数据和先进的计算软件, 而且能为社会迅速提供数据和程序服务^[5]。CALPHAD 方法从建立标准的纯组元数据库开始, 按照二元、三元直到多元体系的数据库优化、构建顺序, 合理地解决了化学成分、温度、压力与材料性质的相关性问题。现今 CALPHAD 方法的内涵已由相图和热化学的计算机耦合拓展至宏观热力学计算与量子化学第一性原理计算相结合、宏观热力学计算与动力学模拟相结合、建立新一代计算软件和多功能数据库, 其科学内容十分丰富, 已成为材料科学成熟的重要分支^[6]。

FactSage 由一系列信息, 数据库, 计算和处理模块构成, 研究人员可以很容易获取和处理纯物质和溶液数据库。该热力学软件是一个非常强大的工具, 可适用于化学和物理学家、冶金学家、

收稿日期: 2017-12-27; 改回日期: 2018-01-14

基金项目: 宁夏科技支撑计划国际合作专项项目 (NXIC-2013); 2017 年度北方民族大学中央高校基本科研业务费专项资金资助 (2017KY01); 校级大学生创新创业训练计划项目 (2017-XJ-CL-014)

作者简介: 韩霄 (1997-), 男, 主要从事金属材料的研究。

通讯作者: 蒋亮 (1982-), 男, 讲师, 博士研究, 主要从事建筑材料节能与环保、合金组织与性能研究; E-mail: jiangliang@nun.edu.cn

化学工程师、地质学家、电化学家、环境学家等广泛范围内的热力学计算。其可以提供相形成、比例、成分以及单个化学组分的行为方面的信息,提供所有组分的热力学性质、压力、温度方面的信息,最新版本为 FactSage Version 7.0(2015.3)。本文借助国内外在钢渣处理领域中已经利用 FactSage 进行的研究,对于该软件在钢渣处理中的应用进行进一步的说明与评价。

2 原材料及试验方法

2.1 原材料

本试验采用宁夏钢铁公司原始钢渣,经四分法缩分→鼓风干燥→颚式破碎→干式手选→粉碎→过 200 目方孔筛等步骤制备试验样品,并利用 X 射线荧光光谱仪测定钢渣的化学组成,表 1 为未经过处理的新转炉钢渣成分。钢渣的主要化学成分为 CaO、SiO₂、Fe₂O₃,而 MgO、Al₂O₃、K₂O、Na₂O 含量较少。由于钢渣的成分中主要为 CaO 和 SiO₂,即 CaO/SiO₂ 比值谓之碱度^[7],钢渣的碱度约为 1.66,属于低碱度渣料。

表 1 钢渣的化学成分 /%

Table 1 Chemical composition of steel slag

CaO	SiO ₂	Fe ₂ O ₃	MgO	Al ₂ O ₃	K ₂ O	Na ₂ O	P/10 ⁻⁶
40.81	24.56	19.52	2.75	0.72	0.16	0.16	2607.70

2.2 试验方法

在实验室模拟钢厂在线重构,取 50 g 原钢渣装入容积为 100 mL 的重制氧化铝坩埚中,置于高温箱式马弗炉内,通过 Rh/Pt 标准热电偶加热,炉内温度通过可编程调节器控制,精度为 ±3℃。在氩气保护下首先加热至 1500℃ 使原钢渣完全熔融,升温速率约为 10℃/min,保温 20 min,以模拟钢厂渣出炉状态。随后降温至设定温度(1250℃、1300℃、1350℃),并将通入气体切换为合成空气。氩气和合成空气通过炉体下方氧化铝管通入,合成空气通入量由玻璃转子流量计监测保持在 5.0 L/min,保温 30 min 后将合成空气切换回氩气并快速冷却至室温,冷却速率约为 25℃/min。

2.3 物相分析

将重构钢渣敲碎,将钢渣碎块粉碎至粒径小于 0.3 mm 粉末状利用 X-射线衍射仪(XRD-6000 Shimadzu, Japan)进行钢渣物相分析。X-射线衍

射仪设定参数为:Cu 靶,衍射角度 10~80°,连续扫描,4°/min,步长 0.02°/step。

3 平衡计算在钢渣处理中的应用

Equilib 模块是 FactSage 的最小 Gibbs 自由能的主要部分,也是最常用的模块。它用来计算给定元素或者化合物反应尤其是达到化学平衡时各物种的浓度。通过 Viscosity 模块处理 Equilib 模块计算出的数据,可以得到在相应条件下炉渣的粘度。

李寒旭等利用软件计算了还原性气氛下,随温度变化,煤灰液相生成量和矿物组成变化趋势,并结合 XRD 分析结果对高温下煤灰行为特征和煤灰熔融温度进行了预测^[8]。李辽沙利用软件计算了钢渣系中 CaO:SiO₂:Fe₂O₃:P₂O₅=54:18:23:5 时的热力学平衡情况^[9]。徐涛等把钢包顶渣近似看作 CaO-SiO₂-Al₂O₃ 渣系,利用软件计算出一定温度和渣系条件下渣中各组元的活度,进而求得钢中酸溶铝和硅含量的关系^[10]。徐冉等利用软件对 CaO-MgO-SiO₂-Al₂O₃-TiO₂ 五元钢渣进行熔点试验,并对所得结论予以验证^[11]。赵定国等利用软件建立了 CaO-SiO₂-B₂O₃ 三元熔渣活度模型,并分析了熔渣碱度、B₂O₃ 含量及温度对熔渣组分活度的影响^[12]。程子健等利用软件计算了 MgO 含量对 Si₂O-CaO-Al₂O₃-xMgO 准三元系液相区大小的影响^[13]。唐辉等通过软件从理论上分析和计算钢渣中的六种主要的含钙镁物相(C₂S (2CaO·SiO₂)、MgSiO₃、CaSiO₃、C₃S (3CaO·SiO₂)、CaO、MgO)在不同浸出剂(乙酸、铵和水)等干法和湿法固定 CO₂ 反应的可行性^[14]。周寒梅等以 CaO-SiO₂-FeO-P₂O₅ 四元渣系为研究对象,应用软件计算该四元渣系在 400-1800℃ 温度区间的多相平衡^[15]。封胜克等利用软件对合成渣系的各温度下平衡态物相转变进行计算^[16]。江露等用软件计算和分析 Al₂O₃ 改性机理,利用矿相显微镜和 SEM+EDS 结合 XRD 分析了原始模拟渣和改性渣的微观形貌^[17]。吴启帆等利用软件对钢渣冷却过程中各物相的析出情况进行模拟,并用 X 射线荧光光谱、X 射线衍射、扫描电镜和能谱分析仪对转炉钢渣的物相组成及其形貌特征进行研究^[18]。程子健等针对酒钢 SPCC 钢的 LF 渣精炼脱硫,建

立了硫分配比与硫容量的关系,并用软件计算渣中 Al_2O_3 的活动^[19]。赵磊通过使用软件计算了不同 (Nb_2O_5) 活度系数、不同渣成分、不同还原剂、温度等热力学条件对渣钢中铌分配比的影响^[20]。赵丽树等利用熔渣结构共存理论建立了渣系 $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-FeO}$ 渣系中 FeO 活度的计算模型,并分析了 1400°C 时炉渣碱度、 MgO 和 FeO 质量分数对该渣系 FeO 活度的影响规律^[21]。通过 Equilib 模块可以针对不同成分钢渣在不同温度、不同压力下的复杂体系达到平衡时状态进行计算,并借助 XRD、EDS、SEM 等测试手段对计算结果进行了验证^[22]。

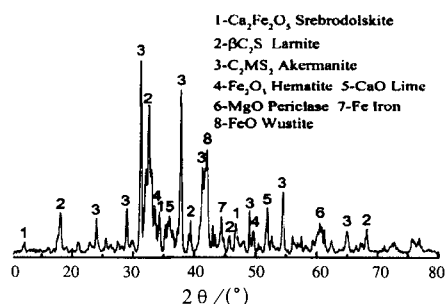


图 1 原钢渣 X 射线衍射图谱

Fig. 1 X-ray pattern of the raw slag

由图 1 原钢渣的 X 射线衍射结果可知,原钢渣中含有较为复杂的矿物相体系,其中包括 $\beta\text{-C}_2\text{S}$ (PDF33-0302), 镁黄长石 (C_2MS_2) (PDF35-0592), 铁酸钙 (C_2F) (PDF47-1744), 浮氏体 (FeO) (PDF06-0615), MgO (PDF45-0946), CaO (PDF37-1497), 赤铁矿 (Fe_2O_3) (PDF33-0664), 和少量的 Fe 单质 (PDF06-0696)。

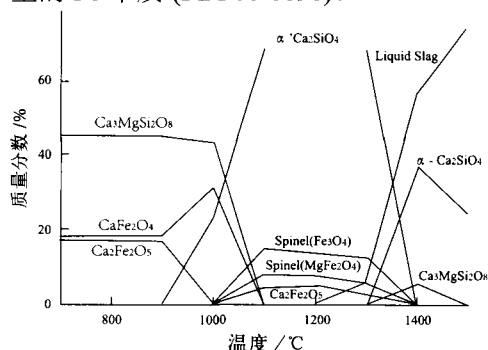


图 2 钢渣体系生成物含量随温度的变化

Fig. 2 Steel slag phase amount varying with temperature

图 2 中利用 FactSage 中的 Equilib 模块计算所得的空气气氛下钢渣中平衡相随温度的变化过

程。矿物相数据库选择为 FToxid-SLAGA, FToxid-SPINA, FToxid-MeO-A, FToxid-bC₂S, FToxid-aC₂S 和 FToxid-Mel。设置环境大气压为 1atm, 氧气分压为 0.21 atm, 反应温度为 $700 \sim 1600^\circ\text{C}$, 原始成分输入参照表 1 中的钢渣化学成分分析。

由图 2 热力学计算结果可知,钢渣在加热至接近 1600°C 时体系中只有熔点较高的 $\alpha\text{-C}_2\text{S}$ 相和液相存在,随体系温度下降,从 1500°C 开始有 C_3MS_2 伴随 $\alpha\text{-C}_2\text{S}$ 析出, $\alpha\text{-C}_2\text{S}$ 从 1400°C 起逐渐向 $\alpha'\text{-C}_2\text{S}$ 发生转变,冷却到 1300°C 后体系中的 $\alpha\text{-C}_2\text{S}$ 和 C_3MS_2 完全转化为其他矿物相。尖晶石群 (Fe_3O_4 和 MgFe_2O_4) 在 1000°C 到 1400°C 区间从钢渣体系中析出,且随环境温度降低析出量逐渐增加,尖晶石群析出量在 1100°C 时达到最大值,当温度降低至 1000°C 时,尖晶石群完全熔解。在 1000°C 到 1400°C 的温度范围内, C_2F 伴随着尖晶石群出现 (1100°C) 和熔解 (1300°C),并在 900°C 重新析出。 1100°C 以下的低温区中有两种钙铁相 C_2F 和 CF 共存。

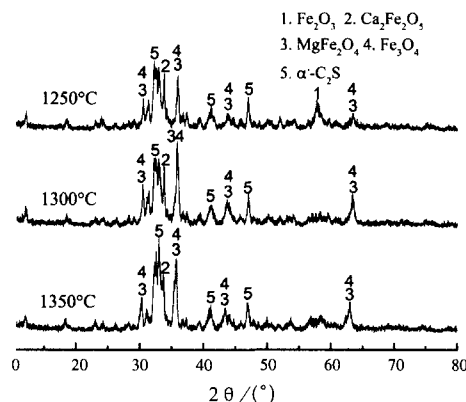


图 3 不同温度下氧化改质钢渣 X 射线衍射

Fig. 3 X-ray diffraction analysis of the oxidized slag at different temperatures

由图 3 重构钢渣 X 射线衍射结果可知,氧化重构钢渣中所含矿物相为 $\alpha'\text{-C}_2\text{S}$ 、铁酸钙,铁酸镁,磁铁矿和赤铁矿。磁铁矿和铁酸镁所对应衍射峰的衍射角度非常接近,在 X 射线衍射结果中很难将二者进行区分。与原钢渣中以 $\beta\text{-C}_2\text{S}$ 为主导相不同的是,重构钢渣中 C_2S 主要以亚稳态 $\alpha'\text{-C}_2\text{S}$ 存在。通过对 1250°C 、 1300°C 、 1350°C 重构钢渣矿物相对比发现,重构温度对于最终所形成矿物相有较大影响作用,随着重构温度从 1250°C 上

升至 1300℃, 磁铁矿和铁酸镁的衍射峰强度明显增强, 而当温度继续上升至 1350℃, 磁铁矿和铁酸镁的衍射峰呈减弱趋势。铁酸钙的衍射峰强度随重构温度上升无明显变化, 赤铁矿所对应的衍射峰只在重构温度为 1250℃ 时出现。X 射线衍射结果与 FactSage 热力学计算结果一致。

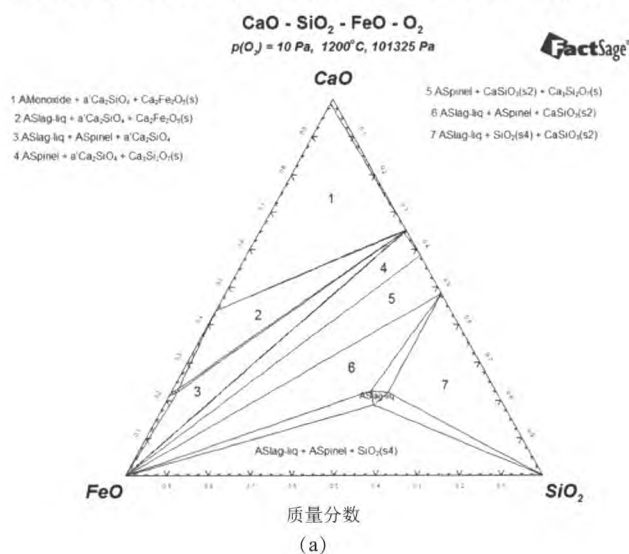
4 相图计算在钢渣处理中的应用

相图被誉为材料设计的指导书、冶金工作者的地图和热力学数据的源泉, 是进行钢渣处理研究的基础。利用计算机在钢渣处理中对相图和平衡数据进行计算不仅节省时间和减少试验工作量, 而且可以绕过某些系统的试验困难, 既具有可行性, 又具有必要性^[23]。FactSage 中的 Phase Diagram 模块能够计算、画出和编辑单元、二元、三元或者多元相图的通用程序, 相图坐标轴可以为 T、P、V 组成、活度、化学势等各种组合。计算出的相图可以自动在 Figure 模块中作图。通过该模块可以计算与画出的相图种类包括: 经典的单元系温度-压力、二元系温度-组成、三元系等温等压 Gibbs 三角相图、多元系的二维截面, 其中的坐标可以为 T、P、V 组成, 活度, 化学势等各种组合、优势区图^[24]。

周寒梅等计算了 CaO-SiO₂-FeO-P₂O₅ 四元渣系在 400~1800℃ 温度区间的多相平衡, 并结合 SEM、EDS 与 XRD 分析了 P₂O₅ 质量分数变化对该四元渣系物相组成以及富磷相的影响^[15]。杨治明等人对 CaO-SiO₂-FeOx-MgO 四元氧化物体系的热力学性质进行了研究, 并依此计算了不同温度及氧分压下 SiO₂-FeOx-MgO、CaO-SiO₂-FeOx 和 CaO-SiO₂-FeOx-MgO 体系液相区和高铁区域的相关关系^[25]。杨阳针对 CaO-SiO₂-MgO-Cr₂O₃ 体系的相平衡进行了相关研究, 借助软件对相关体系平衡状态下的相组成进行了预测^[26]。辛雪倩等人采用 FactSage 相图计算与高温相平衡试验结合的方法, 对 CaO-SiO₂-Al₂O₃-FeOx 四元氧化物体系的热力学性质进行了系统研究, 并采用 OtiSage 数据库优化模块进行优化^[27]。徐冉为解决钢包粘渣问题, 利用软件研究计算了不同含量 RxOy 时 CaO-SiO₂-Al₂O₃-RxOy 四元相图 1500℃ 液相面^[28]。田洪鹏等

计算了 SiO₂-Al₂O₃-CaO-Fe₂O₃-MgO 五元体系在不同组成、温度条件下的多相平衡^[29]。程子健通过软件计算模拟了 CaO-Al₂O₃-MgO 三元体系相图低共熔区, 以此指导钢包炉在精炼过程中抑制 Al₂O₃ 的融入^[19]。徐冉等人采用软件计算了不同 TiO₂ 含量时 CaO-SiO₂-Al₂O₃-TiO₂ 四元系相图 1500℃ 液相面, 研究 TiO₂ 对 CaO-SiO₂-Al₂O₃-TiO₂ 影响规律^[11]。

图 4 利用 FactSage 计算模拟了当 MgO 含量为 2.75% 时, 不同氧分压下 CaO-SiO₂-FeO 相图的组成变化, 设置计算环境大气压为 101.325 kPa, 数据库选择为 FactPS 和 FToxid。由图 4 (a) 可见, 当氧分压为 10 Pa 时, 在 FeO 含量较高, CaO 含量较低区域 (区域 1), 较容易生成钙铁相, Monoxide 相以及 α-C₂S, 而随着 FeO 在整个三元合金体系中含量进一步下降, Monoxide 相开始消失, 同时体系中有液相产生。此外, 在 FeO 含量较低, SiO₂、CaO 含量较高的几个区域中都出现了尖晶石 (Spinel) 相, 同时钙铁相消失。图 4 (a) 区域 6 以下区域均有液相生成。随着氧分压提高到 100 Pa, 原有的尖晶石+钙硅相区域 (图 4 (a) 中区域 5) 被分割成两个区域 (图 4 (b) 中区域 4,7) 尖晶石量开始减少, 并伴随着有钙铁相生成。同时, 带有部分液相的尖晶石+钙硅相区域 (图 4 (a) 中区域 6) 也发生了类似变化, 随着钙铁相生成, 分裂成两个区域 (图 4 (b) 中区域 5, 8)。随着氧气分压升至 1000Pa, 体系中尖晶石相 (Fe₃O₄) 全部被氧化为 Fe₂O₃, 其他物相区没有较大变化 (图 4 (c))。



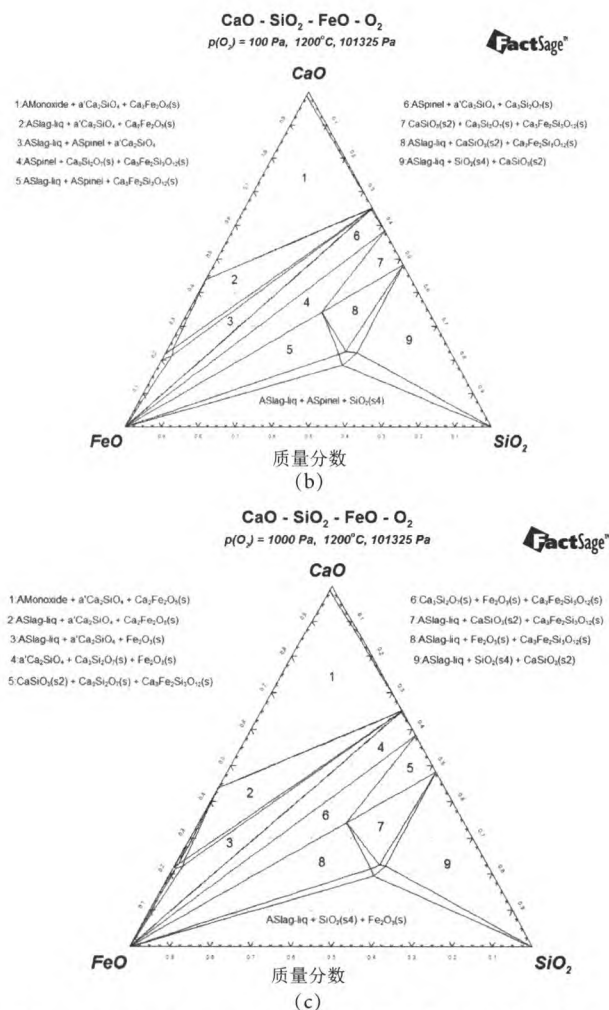


图 4 CaO-SiO₂-FeO 体系在不同氧分压下的等温截面
Fig. 4 Isothermal section of CaO-SiO₂-FeO system at different oxygen partial pressure

由图 4 可知, 通过控制氧分压, 能够控制钢渣体系中 FeOx 的氧化程度。近些年来, 由于温室气体排放的限制, 碳还原钢渣的方法具有一定的局限性。国内外学者探索利用钢渣出炉时的余热和废气 (即 CO₂、O₂ 和空气), 对钢渣中的非磁性 FeO 进行氧化改质, 在控制条件下生成磁性的 Fe₃O₄, 以达到磁选分离的目的^[30-31]。

5 结 语

通过 FactSage 丰富的数据库软件进行模拟计算, 能够在钢渣处理计算中合理建立氧化物体系模型, 使得钢渣处理工艺向理性化、科学化、高效化发展, 从而节约大量的研究经费。FactSage 软件在钢渣处理计算中的广泛应用, 使人们摆脱了

长期以来一直沿用的, 需要经过反复、大量实践摸索的, 试错法模式。能够帮助人们更快捷的进行钢渣处理中的热力学平衡以及动力学计算, 从而简化试验研究工作、节约研究经费、进一步推进钢渣的回收改质处理。

参考文献:

- [1] 何腊梅, 胡燕. 钢渣在炼钢生产中的循环利用 [J]. 钢铁技术, 2013 (4): 2-4.
- [2] 赵爱新. 钢渣处理技术及钢渣粉的综合应用 [A]. 济南市科学技术协会. 济南市 2005 年学术年会论文集 [C]. 济南市科学技术协会, 2005.3.
- [3] 王纯, 杨景玲, 朱桂林, 等. 钢铁渣高价值利用技术发展和现状 [J]. 中国废钢铁, 2012 (1): 42-53.
- [4] 金澜. CALPHAD 方法及 Thermo-Calc 软件在钢铁研发中的应用 [J]. 梅山科技, 2013 (1): 22-25.
- [5] 曹战民, 宋晓艳, 乔芝郁. 热力学模拟计算软件 FactSage 及其应用 [J]. 稀有金属, 2008 (2): 216-219.
- [6] 乔芝郁, 郝士明. 相图计算研究的进展 [J]. 材料与冶金学报, 2005 (2): 83-90.
- [7] 张丕兴, 周士芬, 苏慕珍. 钢渣的矿相研究 [J]. 建材研究院院刊, 1979 (2): 47-57.
- [8] 李寒旭, 二宫善彦, 董众兵, 等. Application of the FactSage to Predict the Ash Melting Behavior in Reducing Conditions [J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2006, (06): 784-789.
- [9] 李辽沙, 于学峰, 余亮, 等. 转炉钢渣中磷元素的分布 [J]. 中国冶金, 2007 (1): 42-45.
- [10] 徐涛, 孙彦辉, 许中波, 等. SPHC 钢 LF 精炼过程钢水增硅分析 [J]. 钢铁, 2009, 44(6): 28-31.
- [11] 徐冉, 宋波, 毛璟红. CaO-MgO-SiO₂-Al₂O₃-TiO₂ 钢渣体系熔化性能 [J]. 北京科技大学学报, 2010, 32(11): 1422-1427.
- [12] 赵定国, 郭培民, 赵沛. CaO-SiO₂-B₂O₃ 熔渣的热力学计算模型 [J]. 钢铁研究学报, 2010, 22(9): 18-21.
- [13] 程子建, 郭靖, 程树森. 酒钢 CSP 流程 SPCC 钢 LF 精炼渣 - 钢平衡及渣成分优化 [J]. 钢铁, 2012 (10): 45-51.
- [14] 唐辉. 利用炼钢厂废渣碳酸化固定 CO₂ 的研究 [D]. 武汉: 武汉科技大学, 2012.
- [15] 周寒梅, 包燕平, 林路. P₂O₅ 对 CaO-SiO₂-FeO-P₂O₅ 渣中富磷相的影响 [J]. 中国冶金, 2013, 23(1): 45-49+53.
- [16] 封胜克, 刘承军, 姜茂发. 不同冷却制度条件下含铬钢渣的物相组成分析 [A]. 中国金属学会炼钢分会、北京金

- 属学会、西安建筑科技大学. 第十八届 (2014 年) 全国炼钢学术会议论文集 -S09: 环保 [C]. 中国金属学会炼钢分会、北京金属学会、西安建筑科技大学, 2014.5.
- [17] 江露, 刁江, 闫小满, 等. Al_2O_3 改性对中高磷转炉渣中磷富集行为的影响 [A]. 金属学会炼钢分会、北京金属学会、西安建筑科技大学. 第十八届 (2014 年) 全国炼钢学术会议论文集 -S04: 氧气转炉炼钢与电炉炼钢 [C]. 金属学会炼钢分会、北京金属学会、西安建筑科技大学, 2014.6.
- [18] 吴启帆, 包燕平, 林路, 等. 转炉钢渣的物相及其冷却析出研究 [J]. 武汉科技大学学报, 2014, 37 (6): 411-414.
- [19] 程子建, 郭靖, 程树森, 等. 酒钢 SPCC 钢的 LF 精炼脱硫 [J]. 钢铁研究学报, 2012, 24 (9): 10-15.
- [20] 赵磊. 锆精矿直接合金化的热力学计算与试验 [D]. 包头: 内蒙古科技大学, 2014.
- [21] 赵丽树, 吕庆, 张淑会, 等. $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-FeO}$ 渣系 FeO 活度的计算模型 [J]. 中国冶金, 2012, 22(10): 23-29.
- [22] Ai X-B, Bai H, Zhao L-H, et al. Thermodynamic analysis and formula optimization of steel slag-based ceramic materials by FactSage software[J]. International Journal of Minerals, Metallurgy, and Materials, 2013, 20(4): 379-385.
- [23] 戴占海, 卢锦堂, 孔纲. 相图计算的研究进展 [J]. 材料导报, 2006 (4): 94-97.
- [24] <http://www.factsage.cn>. [OL][EB/OL].
- [25] 杨治明, 陈敏, 王楠. $\text{CaO-SiO}_2\text{-FeOx-MgO}$ 氧化物体系液相区及相关系计算 [J]. 材料与冶金学报, 2012, 11(2): 93-97.
- [26] 杨阳. $\text{CaO-MgO-SiO}_2\text{-Cr}_2\text{O}_3$ 体系中相平衡研究 [D]. 济南: 山东大学, 2011.
- [27] 辛雪倩. $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-FeOx}$ 四元氧化物体系热力学性质研究 [D]. 沈阳: 东北大学, 2011.
- [28] 徐冉. 钢渣熔化温度理论研究 [A]. 中国自然科学基金委员会工程与材料学部、中国金属学会冶金过程物理化学学术委员会、中国有色金属学会冶金物理化学学术委员会、中国稀土学会. 2010 年全国冶金物理化学学术会议专辑 (上册) [C]. 中国自然科学基金委员会工程与材料学部、中国金属学会冶金过程物理化学学术委员会、中国有色金属学会冶金物理化学学术委员会、中国稀土学会, 2010:6.
- [29] 田洪鹏, 朱学栋, 朱子彬. 应用 FactSage 预测 CaO 助熔剂对模拟灰熔融特性的影响 [A]. 上海市化学化工学会. 上海市化学化工学会 2008 年度学术年会论文集 [C]. 上海: 上海市化学化工学会, 2008.2.
- [30] Semykina A, Shatokha V, Iwase M, et al. Kinetics of oxidation of divalent iron to trivalent state in liquid FeO-CaO-SiO_2 slags[J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 2010, 41(6): 1230-1239.
- [31] Semykina A, Nakano J, Sridhar S, et al. Confocal Scanning Laser Microscopy Studies of Crystal Growth During Oxidation of a Liquid FeO-CaO-SiO_2 Slag[J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 2011, 42(3): 471-476.

Application of FactSage in Steel Slag Treatment

Han Xiao, Cao Yingchuan, Jing Dongrong, Wu Changsong, Ma Liangfu, Wei Jiachuan, Chen Yuhong, Jiang Liang
(North Minzu University, Ningxia, Yinchuan, China)

Abstract: This paper introduces an overview of application circumstance of FactSage in the current slag processing of national and abroad. The application of FactSage on the multi-phase equilibrium calculation of BOF associated with Ningxia Iron and Steel Group. The results show that the mineralogical products in the steel slag can be accurately predicted combining with the SEM-EDS and XRD results. The effect of temperature, pressure and composition on the formation of mineralogical products can be predicted by using FactSage. The optimization of the slag system can be made with respect to the calculation results. The software system has good application prospects in the study of steel slag treatment.

Keywords: Steel Slag; Mineralogical products; FactSage; Application; CALPHAD