

ИЗВЕСТИЯ

ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ ЧЕРНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ

Том 64 Номер 11 2021



• МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ СОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ ПРОКАТКИ РЕЛЬСОВЫХ СТАЛЕЙ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСНОГО КРИТЕРИЯ ОПТИМИЗАЦИИ

ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРОЗИОННОЙ АКТИВНОСТИ СРЕД И СТОЙКОСТИ ИСПОЛЗУЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ В УСЛОВИЯХ ПРИСУТСТВИЯ АГРЕССИВНОГО ДИОКСИДА УГЛЕРОДА

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ЖЕЛЕЗА

• СТАЛИ ОСОБОГО НАЗНАЧЕНИЯ

ПРОЧНОСТЬ И МЕХАНИЗМ РАЗРУШЕНИЯ ПРИ КРУЧЕНИИ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

• ЭКОЛОГИЯ И РАЦИОНАЛЬНОЕ ПРИРОДОПОЛЬЗОВАНИЕ

ОЦЕНКА ВОЗДЕЙСТВИЯ ХИМИЧЕСКИХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ ПРЕДПРИЯТИЙ ЧЕРНОЙ МЕТАЛЛУРГИИ НА ЛЕСНЫЕ МАССИВЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СПУТНИКОВЫХ ФОТОИЗОБРАЖЕНИЙ



ISSN 0368-0797 (Print)
ISSN 2410-2091 (Online)

ИЗВЕСТИЯ

ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

ЧЕРНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ

Том 64, Номер 11, 2021

Научно-технический журнал
Издается с января 1958 г. ежемесячно

IZVESTIYA

FERROUS METALLURGY

Volume 64, Number 11, 2021

Scientific and Technical Journal
Published since January 1958. Issued monthly

ИЗВЕСТИЯ

ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ ЧЕРНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ

www.fermet.misis.ru

ISSN 0368-0797 (Print) ISSN 2410-2091 (Online)

Варианты названия:

Известия вузов. Черная металлургия
Izvestiya. Ferrous Metallurgy

Учредители:



Национальный исследовательский
технологический университет «МИСиС» (НИТУ МИСиС)



Сибирский государственный индустриальный университет

Главный редактор:

Леопольд Игоревич Леонтьев, академик РАН, советник, Президиум РАН; д.т.н., профессор, Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»; главный научный сотрудник, Институт металлургии УрО РАН, г. Москва

Заместитель главного редактора:

Евгений Валентинович Протопопов, д.т.н., профессор, Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк

Адреса редакций:

Россия, 119991, Москва, Ленинский пр-т, д. 4
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Тел.: +7 (495) 638-44-11
E-mail: fermet.misis@mail.ru, ferrous@misis.ru

Россия, 654007, Новокузнецк,
Кемеровская обл. – Кузбасс, ул. Кирова, зд. 42
Сибирский государственный индустриальный университет,
Тел.: +7 (3843) 74-86-28
E-mail: redjizvz@sibsiu.ru

Редакционная коллегия:

Алешин Н.П., академик РАН, д.т.н., профессор, МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Астахов М.В., д.т.н., профессор, НИТУ «МИСиС», г. Москва

Ашихмин Г.В., д.т.н., профессор, ОАО «Ин-т Цветметобработка», г. Москва

Байсанов С.О., д.т.н., профессор, ХМИ им. Ж.Абишева, г. Караганда, Республика Казахстан

Белов В.Д., д.т.н., профессор, НИТУ «МИСиС», г. Москва

Бродов А.А., к.экон.н., ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», г. Москва

Волынкина Е.П., д.т.н., профессор, СибГИУ, г. Новокузнецк

Глезер А.М., д.ф.-м.н., профессор, НИТУ «МИСиС», г. Москва

Горбатов С.М., д.т.н., профессор, НИТУ «МИСиС», г. Москва

Григоревич К.В., академик РАН, д.т.н., ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН, г. Москва

Громов В.Е., д.ф.-м.н., профессор, СибГИУ, г. Новокузнецк

Дмитриев А.Н., д.т.н., академик, профессор, ИМЕТ УрО РАН, г. Екатеринбург

Дуб А.В., д.т.н., профессор, ЗАО «Наука и инновации», г. Москва

Жучков В.И., д.т.н., профессор, ИМЕТ УрО РАН, г. Екатеринбург

Зингер Р.Ф., д.т.н., профессор, Институт Фридриха-Александра, Германия

Зиниград М., д.т.н., профессор, Институт Ариэля, Израиль

Золотухин В.И., д.т.н., профессор, ТулГУ, г. Тула

Колмаков А.Г., д.т.н., чл.-корр. РАН, ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН, г. Москва

Колокольцев В.М., д.т.н., профессор, МГТУ им. Г.И. Носова, г. Магнитогорск

Костина М.В., д.т.н., ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН, г. Москва

Косырев К.Л., д.т.н., профессор, АО «НПО «ЦНИИТМаш», г. Москва

Курганова Ю.А., д.т.н., профессор, МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Курносов В.В., к.ф.-м.н., доцент, НИТУ «МИСиС», г. Москва

Линн Х., ООО «Линн Хай Терм», Германия

Лысак В.И., академик РАН, д.т.н., профессор, ВолгГТУ, г. Волгоград

Мешалкин В.П., академик РАН, д.т.н., профессор, РХТУ им. Д.И. Менделеева, г. Москва

Мулюков Р.Р., д.ф.-м.-н., профессор, чл.-корр. ФГБУН ИПСМ РАН, г. Уфа

Мышляев Л.П., д.т.н., профессор, СибГИУ, г. Новокузнецк

Никулин С.А., д.т.н., профессор, чл.-корр. РАЕН, НИТУ «МИСиС», г. Москва

Нурумгалиев А.Х., д.т.н., профессор, КГИУ, г. Караганда, Республика Казахстан

Островский О.И., д.т.н., профессор, Университет Нового Южного Уэльса, Сидней, Австралия

Пиетрелли Лорис, д.т.н., Итальянское национальное агентство по новым технологиям, энергетике и устойчивому экономическому развитию, Рим, Италия

Подгородецкий Г.С., к.т.н., доцент, НИТУ «МИСиС», г. Москва

Пышминцев И.Ю., д.т.н., РосНИТИ, г. Челябинск

Рудской А.И., академик РАН, д.т.н., профессор, СПбПУ Петра Великого, г. Санкт-Петербург

Сивак Б.А., к.т.н., профессор, АО АХК «ВНИИМЕТМАШ», г. Москва

Симомян Л.М., д.т.н., профессор, НИТУ «МИСиС», г. Москва

Смирнов Л.А., академик РАН, д.т.н., профессор, ОАО «Уральский институт металлов», г. Екатеринбург

Солодов С.В., к.т.н., НИТУ «МИСиС», г. Москва

Спирин Н.А., д.т.н., профессор, УрФУ, г. Екатеринбург

Танг Гуоц, Институт перспективных материалов университета Циньхуа, г. Шеньжень, Китай

Темлянец М.В., д.т.н., профессор, СибГИУ, г. Новокузнецк

Филонов М.Р., д.т.н., профессор, НИТУ «МИСиС», г. Москва

Чуманов И.В., д.т.н., профессор, ЮУрГУ, г. Челябинск

Шеушков О.Ю., д.т.н., профессор, УрФУ, г. Екатеринбург

Шпайдель М.О., д.ест.н., профессор, Швейцарская академия материаловедения, Швейцария

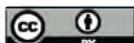
Юрьев А.Б., д.т.н., доцент, СибГИУ, г. Новокузнецк

Юсупов В.С., д.т.н., профессор, ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН, г. Москва

По решению ВАК журнал «Известия вузов. Черная металлургия» входит в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук».

Индексирование: Scopus, Russian Science Citation Index на платформе Web of Science, Research Bible, OCLC и Google Scholar

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи и массовых коммуникаций ПИ № ФС77-35456.



Статьи доступны под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.

СОДЕРЖАНИЕ

CONTENTS

МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

- Дмитриев А.Н., Смирнова В.Г., Вязникова Е.А., Долматов А.В., Виткина Г.Ю. Влияние структуры обожженных окатышей на прочность и разрушение при испытании на статическое сжатие 785
- Кантюков Р.Р., Запевалов Д.Н., Вагапов Р.К. Исследование коррозионной активности сред и стойкости используемых материалов в условиях присутствия агрессивного диоксида углерода 793
- Уманский А.А., Юрьев А.Б. Разработка методики совершенствования прокатки рельсовых сталей на основе комплексного критерия оптимизации 802
- Темлянцева М.В., Базайкина О.Л., Темлянцева Е.Н., Целлермаер В.Я. Моделирование термонапряжений при упрочнении поверхности изделия тепловым импульсом 815
- Рыбенко И.А., Протопопов Е.В. Термодинамическое моделирование процессов восстановления железа ... 825

СТАЛИ ОСОБОГО НАЗНАЧЕНИЯ

- Клевцов Г.В., Валиев Р.З., Фесенюк М.В., Клевцова Н.А., Тюрков М.Н., Абрамова М.М., Рааб Г.И. Прочность и механизм разрушения при кручении ультрамелкозернистой аустенитной стали медицинского назначения 832

ЭКОЛОГИЯ И РАЦИОНАЛЬНОЕ ПРИРОДОПОЛЬЗОВАНИЕ

- Мешалкин В.П., Бутусов О.Б., Дови В.Дж., Белозерский А.Ю., Челноков В.В. Оценка воздействия химических загрязнений предприятий черной металлургии на лесные массивы с использованием спутниковых фотоизображений 839

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

- Иванов Ю.Ф., Громов В.Е., Коновалов С.В., Рубаникова Ю.А., Воробьев С.В. Структурно-фазовые изменения высокоэнтропийного сплава при облучении импульсным электронным пучком 846

METALLURGICAL TECHNOLOGIES

- Dmitriev A.N., Smirnova V.G., Vyaznikova E.A., Dolmatov A.V., Vit'kina G.Yu. Influence of structure of burned pellets on strength and destruction in static compression tests 785
- Kantyukov R.R., Zapevalov D.N., Vagapov R.K. Media corrosiveness and materials resistance at presence of aggressive carbon dioxide 793
- Umanskii A.A., Yur'ev A.B. Improving the technology of rolling rail steels by a comprehensive optimization parameter 802
- Temlyantsev M.V., Bazaikina O.L., Temlyantseva E.N., Tsellermaer V.Ya. Modeling of thermal stresses during hardening the product surface by thermal pulse 815
- Rybenko I.A., Protopopov E.V. Thermodynamic modeling of iron recovery processes 825

SUPERDUTY STEEL

- Klevtsov G.V., Valiev R.Z., Fesenyuk M.V., Klevtsova N.A., Tyur'kov M.N., Abramova M.M., Raab G.I. Strength and fracture mechanism during torsion of ultrafine-grained austenitic steel for medical applications ... 832

ECOLOGY AND RATIONAL USE OF NATURAL RESOURCES

- Meshalkin V.P., Butusov O.B., Dovi V.G., Belozerskii A. Yu., Chelnokov V.V. Assessment of the impact of chemical pollution of ferrous metallurgy enterprises on forests using satellite photographs 839

MATERIAL SCIENCE

- Ivanov Yu.F., Gromov V.E., Konovalov S.V., Shlyarova Yu.A., Vorob'ev S.V. Structural phase variations in high-entropy alloy at irradiation by pulsed electron beam 846



Оригинальная статья

УДК 669

DOI 10.17073/0368-0797-2021-11-825-831



ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ЖЕЛЕЗА

И. А. Рыбенко, Е. В. Протопопов

Сибирский государственный индустриальный университет (Россия, 654007, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

Аннотация. Одним из перспективных направлений в металлургии является использование железосодержащих отходов, таких как шламы конвертерного производства, железосодержащие концентраты, прокатная окалина, отходы обогащения железных руд и другие. Разработка новых ресурсосберегающих технологий с использованием таких отходов требует предварительных исследований и накопления информации в области теории восстановления железа. В работе рассматриваются процессы восстановления железа из оксидов при различных условиях. Используется метод термодинамического моделирования, основанный на поиске максимума энтропии. Инструментом термодинамического моделирования является программный комплекс «Терра», созданный в Московском государственном техническом университете им. Н.Э. Баумана. Комплекс «Терра» предназначен для расчета термодинамических свойств и состава фаз равновесного состояния произвольных систем с химическими и фазовыми превращениями. С использованием этого программного комплекса проведены исследования процессов восстановления железа различными восстановителями (углеродом, марганцем и кремнием) в модельных термодинамических системах, определены оптимальные условия по температуре и расходам восстановителей. В работе представлены результаты исследования процессов в системе металл – шлак, находящейся в равновесии. Проведен анализ равновесного состояния системы металл – шлак в диапазоне температур 1773 – 1973 К при различном количестве шлака. Определены границы областей протекания окислительно-восстановительных процессов и выполнена оценка влияния компонентов металла на условия восстановления оксидов железа из шлака в металл. Получены зависимости равновесного состава системы от температуры при различных соотношениях металла и шлака и определены оптимальные условия восстановления железа.

Ключевые слова: термодинамическое моделирование, инструментальная система, восстановление железа, система металл – шлак, термодинамическое равновесие

Для цитирования: Рыбенко И.А., Протопопов Е.В. Термодинамическое моделирование процессов восстановления железа // Известия вузов. Черная металлургия. 2021. Т. 64. № 11. С. 825–831. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2021-11-825-831>

Original article

THERMODYNAMIC MODELING OF IRON RECOVERY PROCESSES

I. A. Rybenko, E. V. Protopopov

Siberian State Industrial University (42 Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass 654007, Russian Federation)

Abstract. One of the promising directions in metallurgy is the use of iron-containing waste, such as converter production sludge, iron-containing concentrates, rolling scale, iron ore processing waste and others. Development of new resource-saving technologies using such waste requires preliminary research and accumulation of information in the field of iron recovery. The paper considers the processes of iron recovery from oxides under various conditions. The authors used the method of thermodynamic modeling based on the search for the entropy maximum. The thermodynamic modeling tool was TERRA software package created at the Bauman Moscow State Technical University. TERRA complex is designed to calculate the thermodynamic properties and composition of the phases of equilibrium state of arbitrary systems with chemical and phase transformations. Using this software package, studies of the processes of iron recovery by various reducing agents (carbon, manganese, and silicon) in model thermodynamic systems were carried out, and optimal conditions for temperature and consumption of reducing agents were determined. The paper presents the results of a study of processes in the metal-slag system in equilibrium. The analysis of the metal-slag system equilibrium state was carried out for the temperature range of 1773 – 1973 K with different amounts of slag. Boundaries of the areas of redox processes were determined and the influence of metal components on conditions for iron oxides recovery from slag to metal was evaluated. The dependences of the system equilibrium composition on temperature at different ratios of metal and slag were obtained, as well as the optimal conditions for iron recovery.

Keywords: thermodynamic modeling, instrumental system, iron recovery, metal – slag system, thermodynamic equilibrium

For citation: Rybenko I.A., Protopopov E.V. Thermodynamic modeling of iron recovery processes. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2021, vol. 64, no. 11, pp. 825–831. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2021-11-825-831>

ВВЕДЕНИЕ

Одним из перспективных направлений развития современного металлургического производства является использование железосодержащих отходов [1 – 3]. В качестве таких материалов можно использовать шламы конвертерного производства, железосодержащие концентраты, прокатную окалину, отходы обогащения железных руд и т.д. [4 – 7]. В силу конъюнктурных соображений имеющаяся зарубежная техническая информация [8 – 10] по промышленной эксплуатации новых вариантов восстановительных технологий носит общий и зачастую рекламный характер. Попытки использовать опубликованные в печати рекомендации иностранных фирм не дают стабильных и удовлетворительных результатов и требуют проверки в конкретных условиях. Разработка новых технологий, в которых используются при производстве стали окисные материалы, всегда требует предварительных исследований и накопления информации в области теории восстановления железа из окисных систем различными восстановителями [11 – 14]. Поскольку практические и экспериментальные исследования, как правило, являются достаточно дорогостоящими, а зачастую и неосуществимыми, то большое значение приобретает вычислительный эксперимент, который позволяет анализировать состояние систем, протекающие физико-химические процессы и делать выводы о поведении изучаемых объектов на основании модельных представлений.

В настоящей работе представлены результаты исследования процесса восстановления железа из оксидов при различных условиях. Использован метод термодинамического моделирования, основанный на поиске экстремума термодинамического потенциала, а именно максимума энтропии [15 – 17].

МЕТОД И ИНСТРУМЕНТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Метод термодинамического моделирования предоставляет уникальную возможность обобщенного описания любого высокотемпературного состояния с помощью фундаментальных законов термодинамики, независимо от условий и способов достижения равновесия, при минимальной информации о самой системе. Термодинамическая система в данном случае рассматривается как совокупность отдельных подсистем: фаз и индивидуальных конденсированных веществ. В результате для сложной системы (рабочего тела) формулируется задача нахождения равновесного состава компонентов для заданных термодинамических условий, при которых термодинамический критерий, а именно, энтропия системы, представленная функцией параметров состояния, принимает экстремальное значение. Такая формулировка приводит к сложной оптимизационной

задаче, для решения которой используются соответствующие методы и программные средства [15, 16]. Метод максимума энтропии позволяет оценить состав системы в условиях равновесия независимо от способов его достижения и выяснить принципиальную возможность получения тех или иных веществ, выделение которых является основным при решении задачи оценки предельного конечного состояния.

В качестве инструмента при выполнении вычислительных экспериментов с использованием методов термодинамического моделирования выбран программный комплекс «Терра», созданный в Московском государственном техническом университете им. Н.Э. Баумана. Этот программный комплекс предназначен для расчета термодинамических характеристик и состава фаз равновесного состояния произвольных систем с химическими и фазовыми превращениями [17].

С использованием системы «Терра» был проведен ряд исследований по восстановлению металлов в модельных термодинамических системах. Результаты показали хорошую сходимость и согласованность с литературными данными [18 – 20]. В связи с этим использование данной программы является правомерным и допустимым.

В программе осуществляется моделирование предельно равновесных состояний с использованием модели идеального газа. Конденсированные фазы могут быть описаны в приближении несмешивающихся однокомпонентных фаз, идеальных или регулярных растворов. Для задания состава и свойств растворов предусмотрена дополнительная опция. Пока не назначен список веществ ожидаемых конденсированных растворов и не определены парциальные избыточные энтальпии их компонентов, в программной системе все индивидуальные вещества в конденсированном состоянии полагаются однокомпонентными несмешивающимися фазами. Для более сложных моделей конденсированных растворов (строгорегулярные, квазирегулярные, субрегулярные и другие модели) в качестве избыточной энтальпии могут назначаться выражения, зависящие от мольной доли компонента в растворе и температуры [17].

Таким образом, равновесное состояние любой закрытой и изолированной термодинамической системы однозначно определяется значениями двух параметров состояния. В качестве таких характеристик достаточно рассматривать любые две из следующих шести термодинамических параметров: давление, температура, удельный объем, энтропия, полная энтальпия, полная внутренняя энергия.

В программе предусмотрены два варианта моделирования неравновесного состояния:

- непосредственное задание (фиксация) концентраций ряда веществ;
- задание содержания «инертной» (нераагирующей) части веществ в конденсированном состоянии.

В программе существует возможность многовариантных расчетов как в диапазоне концентраций исходных веществ, так и в диапазоне термодинамических параметров, определяющих равновесие, а также возможность записи результатов расчета в файл формата MS Excel с расширением «xls», что облегчает последующую специальную обработку данных и позволяет строить графики. Концентрации компонентов рассчитываются в любой удобной для пользователя размерности.

Элементарная система формируется путем задания числа молей составляющих ее компонентов, при этом в случае необходимости формируются составы конденсированных растворов. В дальнейшем при двух выбранных термодинамических параметрах реализуются многовариантные расчеты равновесных составов в зависимости от этих параметров и расходов исходных материалов. Набор веществ, которые могут образоваться при заданном элементном составе системы, определяли в результате численного моделирования для выбранного диапазона температур и различных термодинамических состояний. Из полного перечня возможных веществ выбирали только те вещества, концентрации которых превышали значение 10^{-4} моль/кг смеси. Проведенные в модельных термодинамических системах исследования по восстановлению металлов показали хорошую сходимость и согласованность с литературными данными [18 – 20].

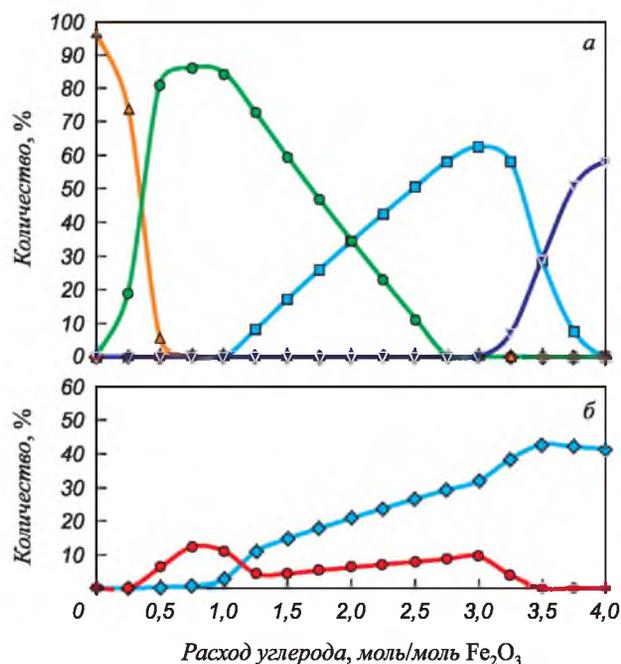


Рис. 1. Зависимости равновесного состава системы $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-C}$ от расхода углерода при температуре 1873 К:

а: \blacklozenge – C; \blacksquare – Fe; \bullet – FeO; \blacktriangle – Fe_3O_4 ; \blacktriangledown – Fe_3C ;
 б: \blacklozenge – CO; \bullet – CO_2

Fig. 1. Dependences of equilibrium composition of $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-C}$ system on carbon flow at 1873 K:

а: \blacklozenge – C; \blacksquare – Fe; \bullet – FeO; \blacktriangle – Fe_3O_4 ; \blacktriangledown – Fe_3C ;
 б: \blacklozenge – CO; \bullet – CO_2

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ЖЕЛЕЗА НА МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

Исследование процесса восстановления железа углеродом проводили на модельной системе $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-C}$. Заданное количество оксида железа составляло 1 моль. Расход углерода варьировали от 0 до 4 молей, от недостатка до избытка количества, необходимого по стехиометрии. Результаты расчетов равновесного состава системы при температуре 1873 К представлены на рис. 1, на котором можно выделить несколько областей. Первая область соответствует изменению расхода углерода от 0 до 0,75 молей: происходит снижение концентрации Fe_3O_4 с одновременным увеличением концентрации FeO в системе; газовая фаза полностью представлена оксидом CO_2 , максимальная концентрация которого в системе соответствует расходу углерода 0,75 молей и составляет 10 %. Далее при увеличении расхода углерода происходит восстановление FeO и в системе начинает возрастать количество восстановленного железа, максимальная концентрация которого соответствует расходу углерода 3 моля.

При избыточном содержании углерода в смеси количество чистого железа уменьшается и в системе начинает накапливаться карбид Fe_3C . В газовой фазе происходит одновременный рост концентраций CO и CO_2 . При расходе углерода 3 моля начинает снижаться содержание CO_2 до его полного исчезновения при расходе углерода 3,5 моля.

Результаты исследования взаимодействия оксида железа с марганцем показали, что марганец полностью восстанавливает железо из оксида во всем диапазоне температур, при которых протекают металлургические процессы.

На рис. 2 представлены результаты расчета равновесных составов в системе $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-Mn}$ в диапазоне

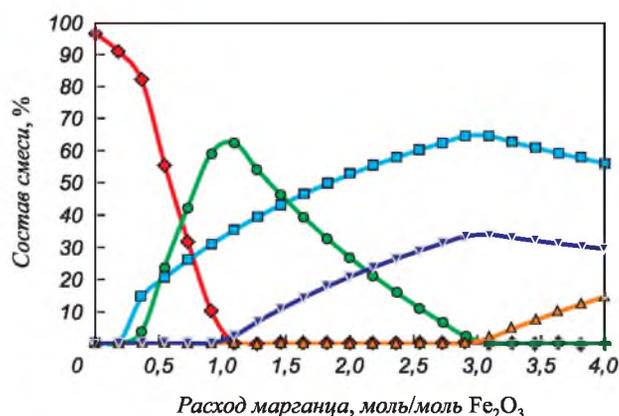


Рис. 2. Зависимости равновесного состава системы $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-Mn}$ от расхода марганца при температуре 1873 К:

\blacklozenge – Fe_3O_4 ; \blacksquare – MnO; \bullet – FeO; \blacktriangle – Mn; \blacktriangledown – Fe

Fig. 2. Dependences of equilibrium composition of $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-Mn}$ system on manganese consumption at 1873 K:

\blacklozenge – Fe_3O_4 ; \blacksquare – MnO; \bullet – FeO; \blacktriangle – Mn; \blacktriangledown – Fe

расхода марганца от 0 до 4 молей при температуре 1873 К.

Количество марганца 1 моль соответствует максимальной концентрации FeO в системе, которая начинает снижаться при увеличении расхода марганца. При количестве 3 моля марганца оксид FeO полностью исчезает. Такой расход соответствует максимальному содержанию железа в системе 65 % и оксида марганца 35 %. Дальнейшее увеличение количества марганца приводит к его накоплению в смеси и разбавлению остальных компонентов.

Результаты исследования взаимодействия оксида железа с кремнием показали, что железо полностью восстанавливается при расходе кремния 1,5 моля во всем диапазоне температур (рис. 3).

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ
В СИСТЕМЕ МЕТАЛЛ – ШЛАК**

В работе проведены исследования окислительно-восстановительных процессов, протекающих в системе металл–шлак, которые находятся в равновесии. Металл содержит 4,0 % С; 0,7 % Мn; 0,7 % Si; 0,3 % Р. Химический состав шлака: 10,0 % MnO; 0,3 % P₂O₅; 20,0 % SiO₂; 50,0 % CaO; 17,0 % FeO.

Были проведены расчеты для 100 кг металла в диапазоне температур 1773 – 1973 К при расходах шлака 8, 10, 12, 14 и 16 кг. На рис. 4, 5 приведены зависимости равновесных содержаний составляющих в металле от температуры при различных расходах шлака. С увеличением температуры происходит снижение концентрации углерода в металле (рис. 4, а), причем при более высоких расходах шлака снижение концентрации углерода начинается при более низких температурах. Так,

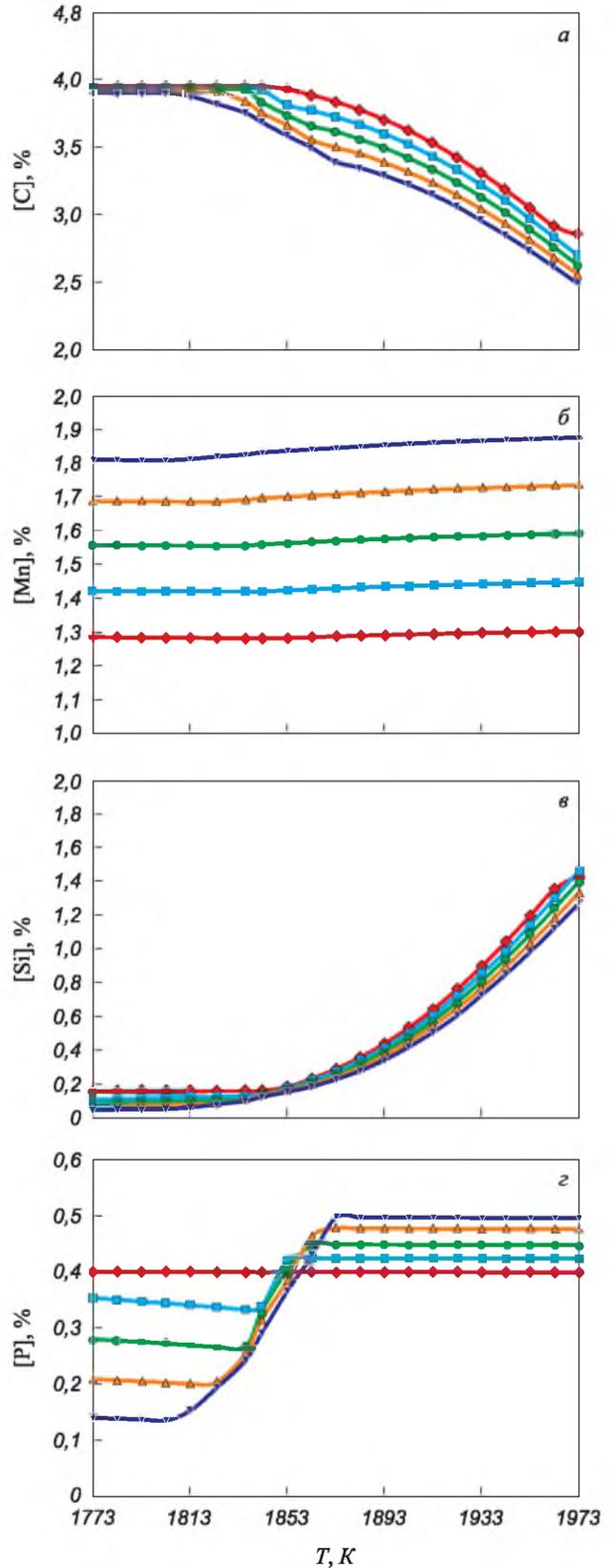


Рис. 4. Зависимости равновесного содержания С (а), Мn (б), Si (в) и Р (г) в металле от температуры при различном количестве подаваемого в систему шлака: ◆ – 8 %; □ – 10 %; ● – 12 %; ▲ – 14 %; ▼ – 16 %

Fig. 4. Dependences of equilibrium content of C (a), Mn (б), Si (в) and P (г) in the metal on temperature at different quantity of supplied slag: ◆ – 8 %; □ – 10 %; ● – 12 %; ▲ – 14 %; ▼ – 16 %

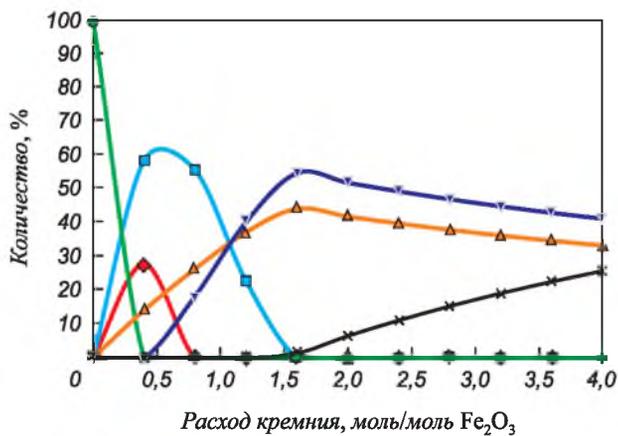


Рис. 3. Зависимости равновесного состава системы Fe₂O₃–Si от расхода кремния при температуре 1873 К:

◆ – Fe₃O₄; □ – FeO; ● – Fe₂O₃; ▲ – SiO₂; ▼ – Fe; × – Si

Fig. 3. Dependences of equilibrium composition of Fe₂O₃–Si system on silicon consumption at 1873 K:

◆ – Fe₃O₄; □ – FeO; ● – Fe₂O₃; ▲ – SiO₂; ▼ – Fe; × – Si

снижение содержания углерода при расходах шлака 8, 10, 12, 14 и 16 кг на 100 кг металла начинается при температурах 1853, 1842, 1836, 1824 и 1803 К соответственно. Для одинаковой температуры при более высоких расходах шлака в целом концентрация углерода меньше. Например, при температуре 1873 К концентрации углерода 3,84, 3,73, 3,62, 3,50 и 3,39 % соответствуют расходам шлака 8, 10, 12, 14 и 16 кг/100 кг металла. Концентрация марганца в металле с изменением температуры меняется незначительно, но существенно зависит от количества подаваемого в систему шлака (рис. 4, б). Максимальное (1,82 – 1,86 %) содержание марганца соответствует расходу шлака 16 кг/100 кг металла, минимальное (1,28 – 1,30 %) – расходу 8 кг/100 кг металла.

Концентрация кремния в металле, наоборот, существенно зависит от температуры и незначительно от количества шлака (рис. 4, в). При температурах ниже 1853 К содержание кремния в металле не меняется и составляет 0,05 – 0,11 %. При увеличении температуры начинается резкий рост концентрации кремния, которая достигает значений 1,30 – 1,45 % при 1973 К в зависимости от расхода шлака. Минимальные концентрации кремния соответствуют максимальным расходам шлака.

На рис. 4, г приведены зависимости содержания фосфора в металле от температуры при различном количестве шлака в системе. При низких температурах концентрация фосфора постоянна и зависит только от расхода шлака. Максимальная концентрация фосфора 0,4 % соответствует количеству шлака в системе 8 кг, минимальная 0,14 % – 16 кг. При увеличении температуры начинается резкий рост содержания фосфора, причем диапазон температур изменения концентраций фосфора существенно зависит от расхода шлака: 1803 – 1873, 1823 – 1868, 1835 – 1863, 1843 – 1853 К и 0 при расходе шлака 16, 14, 12, 10 и 8 кг шлака на 100 кг металла. После переходного периода содержание фосфора стабилизируется и прямо пропорционально зависит от количества шлака в системе: концентрации фосфора 0,40, 0,42, 0,45, 0,48 и 0,50 % соответствуют расходам шлака 8, 10, 12, 14 и 16 кг/100 кг металла.

На рис. 5, а приведены зависимости равновесного содержания MnO в шлаке от температуры при различных расходах шлака. При низких температурах концентрация MnO постоянна и зависит только от расхода шлака. При повышении температуры содержание оксида марганца начинает снижаться, причем температура начала изменения концентрации оксида марганца тем ниже, чем выше расход исходного количества шлака: для расхода шлака 16 кг/100 кг металла температура начала снижения концентрации оксида марганца составляет 1793 К, а для 8 кг/100 кг металла – 1853 К. Низкие значения концентраций оксида марганца соответствуют минимальным расходам шлака в исходной системе. Аналогичные зависимос-

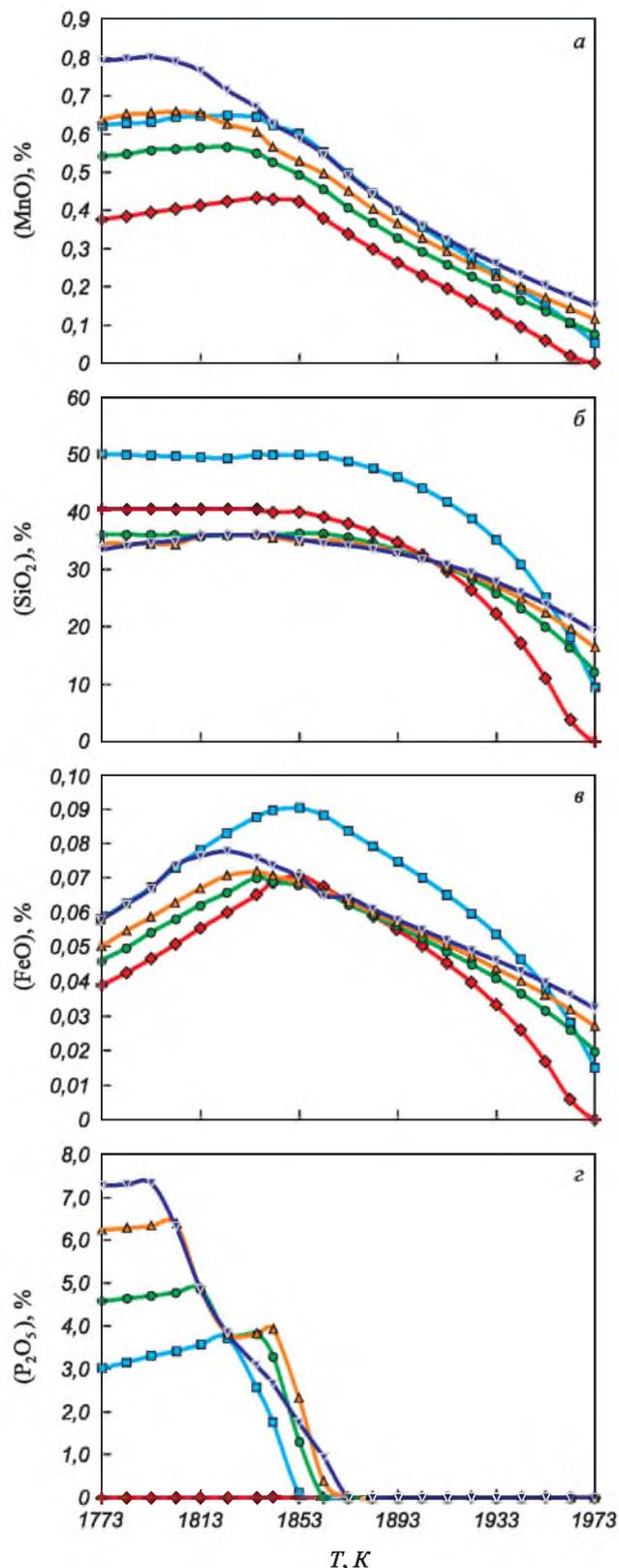


Рис. 5. Зависимости равновесного содержания MnO (а), SiO₂ (б), FeO (в) и P₂O₅ (г) в шлаке от температуры при различном количестве подаваемого в систему шлака:

◆ – 8 %; ■ – 10 %; ● – 12 %; ▲ – 14 %; ▼ – 16 %

Fig. 5. Dependences of equilibrium content of MnO (a), SiO₂ (б), FeO (в) and P₂O₅ (г) in the slag on temperature at different quantity of supplied slag:

◆ – 8 %; ■ – 10 %; ● – 12 %; ▲ – 14 %; ▼ – 16 %

ти получены для содержания оксида кремния в шлаке (рис. 5, б), только температуры начала снижения концентраций SiO_2 сдвинуты вправо и соответствуют примерно 1853 К.

Зависимость равновесного содержания оксида железа от температуры (рис. 5, в) имеет экстремумы. Так, максимальная концентрация FeO 0,09 % соответствует температуре 1853 К и расходу шлака 10 кг/100 кг металла. Концентрация FeO 0,078 % соответствует температуре 1873 К и расходу шлака 16 кг/100 кг металла, 0,072 % – 1835 К и 14 кг/100 кг металла, 0,070 % – 1835 К и 12 кг/100 кг металла, 0,071 % – 1853 К и 8 кг/100 кг металла. В целом же концентрации оксида железа в шлаке низкие, железо практически полностью восстанавливается растворенными в металле углеродом, марганцем и кремнием. Фосфор также восстанавливается в металл с повышением температуры (рис. 5, г). Анализ равновесного состава газовой фазы в зависимости от температуры и расхода шлака показал, что при низких температурах в системе присутствуют 40 % CO и 60 % CO_2 , а при высоких температурах газовая фаза состоит из 100 % CO .

Выводы

Проведены исследования процессов восстановления железа различными восстановителями в модельных термодинамических системах, определены оптимальные условия по температуре и расходам восстановителей. Максимальному содержанию железа 65 % в системе Fe_2O_3 – Mn соответствует расход марганца 3 моля, в системе Fe_2O_3 – Si железо полностью восстанавливается при расходе кремния 1,5 моля во всем диапазоне температур. Также проведен анализ равновесного состояния системы металл–шлак в диапазоне температур 1773–1973 К при различном количестве шлака в системе. Определены границы областей протекания окислительно-восстановительных процессов и проведена оценка влияния компонентов металла на условия восстановления оксидов железа из шлака в металл. Концентрация FeO 0,09 % соответствует температуре 1853 К и расходу шлака 10 кг/100 кг металла, 0,078 % – 1873 К и 16 кг/100 кг металла, 0,072 % – 1835 К и 14 кг/100 кг металла, 0,070 % – 1835 К и 12 кг/100 кг металла, 0,071 % – 1853 К и 8 кг/100 кг металла.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

REFERENCES

1. Люнген Х.Б., Кноп К., Стеффен Р. Современное состояние процессов прямого и жидкофазного восстановления железа // Черные металлы. 2007. № 2. С. 13–25.
2. Юсфин Ю.С., Гиммельфарб А.А., Пашков Н.Ф. Новые процессы получения металла. М.: Metallurgiya, 1994. 320 с.
3. Цымбал В.П., Мочалов С.П. Создание новых металлургических процессов и принципов управления на основе синергетического подхода // Известия вузов. Черная металлургия. 2012. № 2. С. 64–68.
4. Нохрина О.И., Рожихина И.Д., Дмитриенко В.И., Прошунин И.Е., Голодова М.А. Особенности применения природных и техногенных материалов для легирования и модифицирования стали // Черная металлургия. Бюллетень научно-технической и экономической информации. 2019. Т. 75. № 8. С. 944–955. <https://doi.org/10.32339/0135-5910-2019-8-944-954>
5. Роменец В.А. Процесс Ромелт. М.: МИСИС, ИД «Руда и Металлы», 2005. 400 с.
6. Кожухов А.А. Энергосберегающие технологии выплавки стали на основе вспенивания сталеплавильных шлаков. LAP LAMBERT Academic Publishing, 2011. 357 с.
7. Цымбал В.П., Протопопов Е.В., Рыбенко И.А., Олеников А.А., Кожемяченко В.И., Сеченов П.А. Экологически замкнутая энергометаллургическая технология переработки пылевидных железорудных и угольных отходов обогащения // Черная металлургия. Бюллетень научно-технической и экономической информации. 2019. Т. 75. № 4. С. 507–513. <https://doi.org/10.32339/0135-5910-2019-4-507-513>
8. Sakthivel R., Vasumathi N., Sahu D., Mishra B.K. Synthesis of magnetite powder from iron ore tailings // Powder Technology. 2010. Vol. 201. No. 2. P. 187–190. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2010.03.005>
9. Jiabin C., Wenlong J., Lianghui Y. Survey and evaluation of the iron tailings resources in China // Mineral Resources Development. 2010. No. 3. P. 60–62.
10. Bates P., Muir A. Hismelt – low cost iron making. In: Int. Conf. «Commercializing New Hot Metal Processes beyond the Blast Furnace», 2000, June 5-7, Atlanta, Georgia, USA. 2000. P. 1–12.
1. Lyungen Kh.B., Knop K., Steffen R. Current state of the processes of direct and liquid-phase iron recovery. *Chernye metalli*. 2007. no. 2, pp. 13–25. (In Russ.).
2. Yusfin Yu.S., Gimmel'farb A.A., Pashkov N.F. *New Processes of Metal Production*. Moscow: Metallurgiya, 1994, 320 p. (In Russ.).
3. Tsymbal V.P., Mochalov S.P. Creating new metallurgical processes and process control on the basis of synergetic approach. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2012, no. 2, pp. 64–68. (In Russ.).
4. Nokhrina O.I., Rozhikhina I.D., Dmitrienko V.I., Proshunin I.E., Golodova M.A. Peculiarities of application of natural and man-caused materials for steel alloying and modifying. *Chernaya metallurgiya. Bulletin of Scientific, Technical and Economic Information*. 2019, vol. 75, no. 8, pp. 944–954. (In Russ.). <https://doi.org/10.32339/0135-5910-2019-8-944-954>
5. Romenets V.A. *The Romelt Process*. Moscow: MISIS, Ruda i Metall, 2005, 400 p. (In Russ.).
6. Kozhukhov A.A. *Energy-Saving Technologies of Steel Smelting based on Steelmaking Slags Foaming*. LAP LAMBERT Academic Publishing, 2011, 357 p. (In Russ.).
7. Tsymbal V.P., Protopyov E.V., Rybenko I.A., Olenikov A.A., Kozhemyachenko V.I., Sechenov P.A. Ecologically closed energy-metallurgical technology of powdered iron ore and coal-cleaning wastes processing. *Chernaya metallurgiya. Bulletin of Scientific, Technical and Economic Information*. 2019, vol. 75, no. 4, pp. 507–513. (In Russ.). <https://doi.org/10.32339/0135-5910-2019-4-507-513>
8. Sakthivel R., Vasumathi N., Sahu D., Mishra B.K. Synthesis of magnetite powder from iron ore tailings. *Powder Technology*. 2010, no. 201, no. 2, pp. 187–190. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2010.03.005>
9. Jiabin C., Wenlong J., Lianghui Y. Survey and evaluation of the iron tailings resources in China. *Mineral Resources Development*. 2010, no. 3, pp. 60–62.
10. Bates P., Muir A. Hismelt – low cost iron making. In: *Int. conf. «Commercializing New Hot Metal Processes beyond the Blast Furnace»*, 2000, June 5-7, Atlanta, Georgia, USA. 2000, pp. 1–12.

11. Nokhrina O.I., Rozhikhina I.D., Khodosov I.E. Manufacturing and application of metalized ore-coal pellets in synthetic pig iron smelting // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2016. Vol. 142. Article 12068.
<https://doi.org/10.1088/1757-899X/142/1/012068>
12. Inada Y. Improvements in the MIDREX® direct reduction process // R&D Kobe Steel Engineering Reports. 2000. Vol. 50. No. 3. P. 86–89.
13. Mouer A., etc. Direct from MIDREX, 2nd Quarter. 2009. P. 3–9.
14. Kempken J., Kleinschmidt G., Schmale K., Thiedemann U., Gaines H.P., Kopfle J.T. Short route – long-term success, integrated mini-mill solutions by Midrex and SMS Demag // Archives of Metallurgy and Materials. 2008. Vol. 53. No. 2. P. 331–336.
15. Ваголин Н.А., Трусов Б.Г., Моисеев Г.К. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических системах. М.: Металлургия, 1994. 352 с.
16. Белов Г.В., Трусов Б.Г. Термодинамическое моделирование химически реагирующих систем. М.: изд. МГТУ имени Н.Э. Баумана, 2013. 96 с.
17. Трусов Б.Г. Программная система ТЕРРА для моделирования фазовых и химических равновесий при высоких температурах. В кн.: III межд. симпозиум «Горение и плазмохимия». 24–26 августа 2005. Алматы, Казахстан. Алматы: Казак университети, 2005. С. 52–57.
18. Golodova M.A., Rozhikhina I.D., Nakhrina O.I., Rybenko I.A. Thermodynamic modeling of restoring items converter vanadium slag // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2016. Vol. 150. Article 012016.
<https://doi.org/10.1088/1757-899X/150/1/012016>
19. Рыбенко И.А., Нохрина О.И., Рожихина И.Д., Голодова М.А., Цымбал В.П. Разработка ресурсосберегающих технологий прямого легирования стали на основе методов термодинамического моделирования процессов восстановления металлов в элементарных системах // Известия вузов. Черная металлургия. 2017. Т. 60. № 2. С. 91–98.
<https://doi.org/10.17073/0368-0797-2017-2-91-98>
20. Нохрина О.И., Рожихина И.Д., Рыбенко И.А., Ходосов И.Е. Разработка основ энергоэффективных процессов металлизации с использованием термодинамического моделирования // Известия вузов. Черная металлургия. 2016. Т. 59. № 4. С. 237–244. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2016-4-237-244>
11. Nokhrina O.I., Rozhikhina I.D., Khodosov I.E. Manufacturing and application of metalized ore-coal pellets in synthetic pig iron smelting. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2016, vol. 142, article 12068.
<https://doi.org/10.1088/1757-899X/142/1/012068>
12. Inada Y. Improvements in the MIDREX® direct reduction process. R&D Kobe Steel Engineering Reports. 2000, vol. 50, no. 3, pp. 86–89.
13. Mouer A., etc. Direct from MIDREX, 2nd Quarter. 2009, pp. 3–9.
14. Kempken J., Kleinschmidt G., Schmale K., Thiedemann U., Gaines H.P., Kopfle J.T. Short route – long-term success, integrated mini-mill solutions by Midrex and SMS Demag. Archives of Metallurgy and Materials. 2008, vol. 53, no. 2, pp. 331–336.
15. Vatolin N.A., Trusov B.G., Moiseev G.K. Thermodynamic Modeling in High-Temperature Inorganic Systems. Moscow: Metallurgiya, 1994, 352 p. (In Russ.).
16. Belov G.V., Trusov B.G. Thermodynamic Modeling of Chemically Reacting Systems. Moscow: N.E. Bauman MSTU, 2013, 96 p. (In Russ.).
17. Trusov B.G. TERRA software system for modeling phase and chemical equilibria at high temperatures. In: III Int. Symp. "Combustion and Plasma Chemistry". August 24–26, 2005, Almaty, Kazakhstan. Almaty: Kazak universiteti, 2005, pp. 52–57. (In Russ.).
18. Golodova M.A., Rozhikhina I.D., Nakhrina O.I., Rybenko I.A. Thermodynamic modeling of restoring items converter vanadium slag. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2016, vol. 150, article 012016.
<https://doi.org/10.1088/1757-899X/150/1/012016>
19. Rybenko I.A., Nokhrina O.I., Rozhikhina I.D., Golodova M.A., Tsybmal V.P. Development of resource-saving technologies of steel direct alloying on the basis of thermodynamic modeling of metals recovery processes in elementary systems. Izvestia. Ferrous Metallurgy. 2017, vol. 60, no. 2, pp. 91–98. (In Russ.).
<https://doi.org/10.17073/0368-0797-2017-2-91-98>
20. Nokhrina O.I., Rozhikhina I.D., Rybenko I.A., Khodosov I.E. Development of the principles of energy efficient processes of metallization using thermodynamic modeling. Izvestia. Ferrous Metallurgy. 2016, vol. 59, no. 4, pp. 237–244. (In Russ.).
<https://doi.org/10.17073/0368-0797-2016-4-237-244>

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Инна Анатольевна Рыбенко, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой прикладных информационных технологий и программирования, Сибирский государственный индустриальный университет
ORCID: 0000-0003-1679-0839
E-mail: rybenkoi@mail.ru

Евгений Валентинович Протопопов, д.т.н., профессор кафедры металлургии черных металлов, Сибирский государственный индустриальный университет
ORCID: 0000-0002-7554-2168
E-mail: protopopov@sibsiu.ru

Inna A. Rybenko, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Head of the Chair of Applied Information Technologies and Programming, Siberian State Industrial University
ORCID: 0000-0003-1679-0839
E-mail: rybenkoi@mail.ru

Evgenii V. Protopopov, Dr. Sci. (Eng.), Prof. of the Chair of Ferrous Metallurgy, Siberian State Industrial University
ORCID: 0000-0002-7554-2168
E-mail: protopopov@sibsiu.ru

Поступила в редакцию 22.10.2021
После доработки 29.10.2021
Принята к публикации 01.11.2021

Received 22.10.2021
Revised 29.10.2021
Accepted 01.11.2021