

Моделирование фазовых равновесий системы Ca, Fe // O, S в рамках обобщенной теории регулярных ионных растворов

© Працкова*⁺ Светлана Евгеньевна и Марданов Алексей Олегович

Кафедра аналитической и физической химии. Челябинский государственный университет.

ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Россия.

Тел.: (351) 99-70-64. E-mail: se_pratskova@mail.ru.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: оксидные расплавы, обобщенная теория «регулярных» ионных растворов, активности компонентов, энергетические параметры теории.

Аннотация

Сера относится к вредным примесям чугуна, ухудшающим качество металла. Поэтому, большое внимание уделяется проблеме снижения серы в чугуне, а затем и в стали. Большая часть серы растворяется в чугуне в виде FeS. Одним из способа внедоменного удаления серы из чугуна является десульфурация. В качестве реагента в данном процессе используют порошкообразную обожженную известь CaO.

В статье приведены результаты термодинамического моделирования системы Ca, Fe // O, S в рамках обобщенной теории «регулярных» ионных растворов. Выведены уравнения для расчета активности компонентов исследуемой системы. Рассчитаны энергетические параметры модели с учетом опытных данных и характеристик плавления чистых оксидов и сульфидов для систем CaO – CaS, FeO – FeS, FeS – CaS, FeO – CaO. Значения энергетических параметров хорошо согласуются с экспериментальными данными. Рассчитаны бинарные диаграммы состояния изучаемой системы. Диаграммы FeO – FeS, CaO – CaS, FeO – CaO, FeS – CaS рассчитаны на всем интервале мольных долей от 0 до 1. Определена энергия Гиббса обменной реакции $FeS + CaO = FeO + CaS$ на основании следующих данных: термодинамические параметры, характеризующие процессы плавления оксидов и сульфидов железа и кальция, значения приведенного термодинамического потенциала Φ_T^0 и стандартных энтальпий веществ $\Delta_f H_{0,i}^0$ при абсолютном нуле. На основании значений энергетических параметров, рассчитанных для двойных систем и энергии Гиббса обменной реакции построена диаграмма FeS – CaO с простой эвтектикой при 90 % мол. FeS и 10 % мол. CaO, плавящейся при 1407К.