

Al_2O_3 含量对低碱度精炼渣微观结构与性能的影响

黄永生¹, 吕子宇², 顾 超², 包燕平^{2*}

(1. 中天钢铁集团技术中心, 江苏 常州 213003; 2. 北京科技大学绿色低碳钢铁冶金全国重点实验室, 北京 100083)

摘 要: 探讨了低碱度精炼渣系 $\text{CaO-MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ 中 Al_2O_3 含量对其微观结构和性能的影响。采用分子动力学模拟方法, 系统地分析了不同 Al_2O_3 含量对低碱度精炼渣系的微观结构与性质的影响。结果表明, Al_2O_3 含量的增加对体系的径向分布函数、配位数和键角等无明显影响, 但显著降低了体系的 FO 和 NBO 含量, 强化了体系的网络结构。此外, Al_2O_3 含量的增加使渣系中元素的扩散能力降低, 扩散能力的顺序为 $\text{Mg}^{2+} > \text{Ca}^{2+} > \text{Al}^{3+} > \text{O}^{2-} > \text{Si}^{4+}$ 。随着 Al_2O_3 质量分数的增加, 渣系黏度逐渐增大, 这与扩散系数的变化趋势相反。该结果建立了低碱度渣系结构与性能之间的联系, 为非铝脱氧工艺采用适合的低碱度渣提供了理论支撑。

关键词: 精炼渣; 低碱度; Al_2O_3 含量; 分子动力学模拟; 黏度; 扩散系数

中图分类号: TF703.6

文献标志码: A

文章编号: 1004-7638(2025)02-0134-08

DOI: 10.7513/j.issn.1004-7638.2025.02.019

开放科学 (资源服务) 标识码 (OSID):



听
语
音
与
作
者
互
动
聊
科
研

The influence of Al_2O_3 content on the microstructure and properties of low basicity refining slag

HUANG Yongsheng¹, LÜ Ziyu², GU Chao², BAO Yanping^{2*}

(1. Technology Center, Zenith Steel Group Co., Ltd., Changzhou 213003, Jiangsu, China; 2. State Key Laboratory of Advanced Metallurgy, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

Abstract: The effect of Al_2O_3 content on the microstructure and properties of low basicity refining slag system $\text{CaO-MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ was investigated. The effect of different Al_2O_3 contents on the microstructure and properties of the low basicity refining slag system was systematically analyzed using molecular dynamics simulation. The results showed that the increase of Al_2O_3 content had no significant effect on the radial distribution function, coordination number and bond angle of the system, but significantly reduced the FO and NBO contents of the system and strengthened the network structure of the system. In addition, the increase of Al_2O_3 content decreased the diffusion ability of elements in the slag system, and the order of diffusion ability was $\text{Mg}^{2+} > \text{Ca}^{2+} > \text{Al}^{3+} > \text{O}^{2-} > \text{Si}^{4+}$. The viscosity of the slag system gradually increased with the increase of Al_2O_3 mass fraction, which was opposite to the trend of the diffusion coefficient. The results establish a link between the structure and performance of low basicity slag systems, and provide theoretical support for the use of suitable low basicity slags for non-aluminum deoxidation processes.

Key words: refining slag, low basicity, Al_2O_3 content, molecular dynamics simulation, viscosity, diffusion coefficient

收稿日期: 2024-10-18

基金项目: 国家自然科学基金 (52174297); 广东省基础与应用基础研究基金 (2022A1515110062); 青年人才托举工程 (2022QNRC001)。

作者简介: 黄永生, 1977 年出生, 男, 江苏常州人, 本科, 工程师, 主要从事钢液的洁净化与夹杂物去除的研究, E-mail: 15210951549@sina.cn; * 通讯作者: 包燕平, 1963 年出生, 男, 北京人, 博士, 教授, 主要从事二次精炼和中间包冶金的研究, E-mail: baoy@ustb.edu.cn。

0 引言

针对高品质轴承钢的生产,近年来,国内部分学者开展了非铝脱氧冶炼轴承钢的研究,并取得显著成果^[1-3]。由于生产制度的改变,生产过程中精炼渣系选择了与铝脱氧方式不同的低碱度渣,不仅提高了钢液流动性,还减少了卷渣的问题,同时显著降低了轴承钢中Ds类夹杂物含量,对轴承钢疲劳性能具有提升作用。然而,低碱度渣可能对钢包内衬和RH耐火材料侵蚀速度加剧,钢液中[Al]含量控制要求高,需优选物料,否则容易使夹杂物成分和数量产生较大波动^[4]。刘春伟等^[5]研究了VD低碱度渣对GCr15轴承钢夹杂物的影响,结果表明VD低碱度渣精炼有利于实现轴承钢夹杂物塑性化控制。马廷温等^[6]开展了EAF-CAB-低碱度渣处理轴承钢脱氧效果的研究,发现通过钢包加盖吹氩并采用合理渣系处理轴承钢可以有效提高轴承钢质量。许涛^[7]研究了轴承钢低碱度渣精炼过程夹杂物控制,结合工业生产特点发现低碱度精炼渣碱度控制在1.0左右,加Al量控制在 6.0×10^{-4} 以下时,可获得较好的夹杂物塑性化效果。尽管针对低碱度渣轴承钢生产开展了大量工业试验与实验室研究,但 Al_2O_3 含量对低碱度渣的结构和性能的影响机理仍未完全明晰。

在实际的精炼过程中,渣在高温下工作,由于反应在高温下难以可视化,且开展大规模不同成分的渣系性能检测试验难度较高,周期较长,因此部分研究人员开始通过分子动力学模拟的方法进行高温下的渣系研究,研究领域包括了高炉渣、转炉渣、精炼渣以及部分渣二次利用后的产品。曹亚然等^[8]对 Al_2O_3 炉渣结构与黏度影响进行了研究,发现随着渣中 Al_2O_3 质量分数的增加,各原子的自扩散系数逐渐减小,黏度逐渐增大,当 Al_2O_3 质量分数超过16%时,黏度增加变得缓慢。胡金等^[9]研究了 B_2O_3 对含钛高炉渣熔体微观结构与输运性质的影响,结果表明,随着 B_2O_3 含量的增加,B-O-M(Ca、Si、B和Ti)氧连接占比增多,熔体中高配位结构解聚为低配位结构,体系整体聚合度降低,各离子自扩散系数均增大,熔体黏度从0.183 Pa·s降低到0.140 Pa·s。孙涛^[10]研究了赤泥基微晶玻璃的微观结构及其黏度特性,发现体系中加入粉煤灰可以促进网络结构更稳定、更紧密。上述结果均表明了分子动力学模拟方法在冶金渣系研究中表现出显著的有效性。

文中通过分子动力学模拟研究了 Al_2O_3 含量对低碱度CaO-MgO- Al_2O_3 - SiO_2 渣系的微观结构特征

与性质的影响。研究从渣系微观结构特性到宏观的体系黏度出发,揭示了微观结构变化对低碱度精炼渣系的精炼效果与冶金性能的影响规律。通过控制渣系中合适的 Al_2O_3 含量,以满足冶炼过程的实际需求,为非铝脱氧轴承钢冶炼过程中渣系的优化提供了理论依据,并为实际生产中钢材质量提高和成本降低提供了指导。

1 计算方法

1.1 建模方法和参数选择

模拟试验选择的渣系成分中,MgO含量为5%,碱度为1, Al_2O_3 含量以5%的间隔从0增加至30%,以分析 Al_2O_3 含量对渣的黏度和扩散性质的影响。渣的熔点在相图中的分布如图1所示,熔点均在1600℃以下。渣系密度采用炉渣比容计算,如式(1)和式(2)所示。计算采用的渣系具体成分如表1所示。

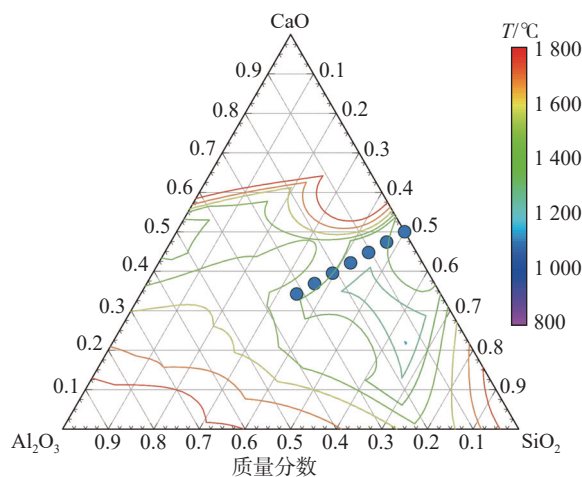


图1 目标渣系在相图上的分布示意
Fig. 1 Schematic diagram of the distribution of the target slag system on the phase diagram

$$\frac{1}{\rho_{\text{slag}}^0} = 0.45 \times w(\text{SiO}_2) + 0.285 \times w(\text{CaO}) + 0.367 \times w(\text{MgO}) + 0.402 \times w(\text{Al}_2\text{O}_3) \quad (1400^\circ\text{C}) \quad (1)$$

$$\rho_{\text{slag}} = \rho_{\text{slag}}^0 + 0.07 \times \left(\frac{1400 - T}{100} \right) \quad (2)$$

式(1)和(2)中 ρ_{slag}^0 为1400℃时的渣系密度, g/cm^3 ; ρ_{slag} 为不同温度时的渣系密度, g/cm^3 ; T 为温度, $^\circ\text{C}$ 。

Buckingham势函数是一种用于描述原子间相互作用的数学模型,能够描述离子间的长程范德华力和短程排斥作用,适用于复杂多组元体系的模拟。目前,已有学者成功将该函数运用在熔融冶金渣的

性能研究中^[11-13]。采用 Buckingham 势函数对 CaO-MgO-Al₂O₃-SiO₂ 渣系进行计算, 见式(3)。势函数参数如表 2 所示。

$$V(r_{ij}) = \frac{z_i z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + A_{ij} e^{-\left(\frac{r_{ij}}{\rho_{ij}}\right)} - \frac{C_{ij}}{r_{ij}^6} \quad (3)$$

式(3)中 $V(r_{ij})$ 是原子间距离为 r_{ij} 的势能; z_i, z_j 是 i 和 j 原子的有效电荷; ϵ_0 为介电常数; r_{ij} 为原子 i 和 j 之间的原子距离; A_{ij}, ρ_{ij} 是原子间吸引作用能量参数; C_{ij} 为原子间排斥作用能量参数。

表 1 渣系成分
Table 1 Slag compositions %

模型	CaO	Al ₂ O ₃	SiO ₂	MgO
A0	47.5	0	47.5	5
A1	45	5	45	5
A2	42.5	10	42.5	5
A3	40	15	40	5
A4	37.5	20	37.5	5
A5	35	25	35	5
A6	32.5	30	32.5	5

表 2 原子有效电荷和 Buckingham 势函数参数^[14]
Table 2 Atomic effective charge and Buckingham potential function parameters

元素	原子有效电荷/e	Buckingham 势函数参数		
		A_{ij}/eV	$\rho_{ij}/\text{\AA}$	$C_{ij}/\text{eV}\cdot\text{\AA}^6$
Si	+2.4	13 702.91	0.193 817	54.681
Al	+1.8	12 201.42	0.195 628	31.997
Ca	+1.2	7 747.183	0.252 623	93.109
Mg	+1.2	7 063.490 7	0.210 901	19.210
O	-1.2	2 029.22	0.343 645	192.58

注: 1 Å=0.1 nm

采用 LAMMPS^[15] (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator, 31Aug2021) 软件进行分子动力学模拟, 模拟体系包含约 10 000 个原子, 模拟实际冶金过程, 初始温度设为 5 000 K 进行系统弛豫, 随后以 10¹³ K/s 的冷却速率降至 1 873 K。计算中, 设定 1.0 nm 作为截断半径, 确保短程相互作用的精确计算, 长程库仑相互作用则通过 PPPM 算法处理, 计算精度设定为 10⁻⁶ eV。模拟在 NVT 系统下进行, 采用 Verlet 算法积分运动方程, 并通过 Nose-Hoover 热浴法维持恒定温度。模拟步长设定为 1 fs, 系统在达到目标温度后保持 1 ns, 以确保达到平衡状态, 期间记录原子轨迹。为深入分析渣系结构的微观机制, 研究还使用 OVITO(2.9)、Matlab (2021a) 和 VMD(1.9.3) 等软件工具从微观层面定量理解渣系结构的变化。其中, OVITO 和 VMD 用于可视化原子间相互作用与原子轨迹的读取, Matlab 用汉语进行数学分析。

1.2 性质计算方法

1.2.1 径向分布函数和配位数计算方法

径向分布函数(RDF)是通过计算所有粒子对之间的间距, 并将其分类为直方图来确定, 表达式如式(4)所示。在 RDF 值曲线中, 第一个极值是原子与其相邻原子之间的距离。极值曲线下的面积计算为配位数, 表达式如式(5)所示。

$$g(r) = \frac{V n(r, \Delta r)}{N 4\pi r^2} \quad (4)$$

$$N_{ij} = 4\pi \int_{r_0}^{r_1} r^2 g_{ij}(r) \rho dr \quad (5)$$

式(5)中, N/V 是 dr 内粒子的数量密度; $n(r, \Delta r)$ 是中心原子周围其他原子的平均数量; r_0 是从 $r=0$ 开始的最右侧位置, 此时 $g(r)$ 近似为零; r_1 是第一个最小值。

1.2.2 均方根位移和扩散系数计算方法

均方位移(MSD)是所有粒子在 t 时刻从各自初始点出发的平均距离, 计算方法如式(6)(7)所示。

$$\text{MSD} = \langle |r(t_0 + t) - r(t_0)|^2 \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [r_i(t_0 + t) - r_i(t_0)]^2 \right\rangle \quad (6)$$

$$\text{MSD} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [(dx_i)^2 + (dy_i)^2 + (dz_i)^2] \quad (7)$$

式(6)和(7)中, N 为原子组中的原子个数, 且为常数; $r_i(t_0 + t)$ 为原子在 $t_0 + t$ 时刻的位置; $r_i(t_0)$ 为原子在初始时刻 t_0 的位置, 该计算是对整个原子组进行系统平均。对于三维系统, MSD 与扩散系数 D 的关系如式(8)所示。

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6} \frac{d[\langle |r(t_0 + t) - r(t_0)|^2 \rangle]}{dt} \quad (8)$$

1.3 黏度计算方法

流体的黏度是衡量阻碍流体流动的内摩擦力的指标。MÜLLER-PLATHE^[16] 等提出反扰动非平衡方法(RNEMD)计算剪切黏度, 它通过交换动量通量实现, 如式(9)和(10)所示。计算时, 固定结构两端, 将体系沿 z 轴切片, 切割为 20 片, 然后交换中心和两侧的动量分量来构建速度梯度场, 从而计算黏度。

$$j_z(p_x) = -\eta \frac{\partial v}{\partial x} \quad (9)$$

$$\eta = -\frac{\sum_{\text{transfer}} (p_{x,1} - p_{x,11})}{2\Delta t L_x L_y \left\langle \frac{\partial v_x}{\partial z} \right\rangle} \quad (10)$$

式(9)和(10)中 L_x 和 L_y 是模拟盒子在 x 和 y 方

向上的长度; $j_z(p_x)$ 为在时间 t 内流过 $(L_x \times L_y)$ 区域垂直于通量方向 (z) 的表面的动量; η 为剪切黏度; $\sum_{\text{transfer}} (p_{x,1} - p_{x,11})$ 为总的动量交换量; $\frac{\partial v_x}{\partial z}$ 为剪切场, 即流体速度 x 方向分量相对于 z 方向的梯度。

此外, 还采用了 Factsage 软件的黏度模块与 ZHANG^[17] 提出的黏度模型对体系的黏度进行了计算, 以协同描述成分变化对体系性能的影响。

2 结果与讨论

2.1 局部网状结构

图 2 展示了 $\text{CaO-MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ 渣系在不同 Al_2O_3 含量下的微观局部网状结构特征。渣中 Si 和 Al 作为网络形成体, 通过共价键连接形成 $[\text{SiO}_4]$ 四面体和 $[\text{AlO}_4]$ 四面体, 构成了渣相的基础三维网状结构, 这种结构为渣系提供了刚性和稳定性。随着 Al_2O_3 含量的增加, 渣系的局部网状结构发生了变化。 Al^{3+} 离子的引入增加了网络中 $[\text{AlO}_4]$ 四面体

的数量, 从而增强了渣系的复杂程度。这些 $[\text{AlO}_4]$ 四面体在渣系中均匀分布, 与 $[\text{SiO}_4]$ 四面体形成了更加稳固的网络结构, 提高了渣系的结构稳定性。 Ca^{2+} 和 Mg^{2+} 作为网络修饰体存在于网状结构的间隙中, 这些元素的分布对渣系的物理性质产生了影响。

RDF 作为一种关键的结构表征工具, 能够揭示材料局部原子排列的周期性和有序性, A6 模型的离子-O 的 RDF 曲线和配位曲线如图 3 所示。可以看到, Si-O 的第一配位距离最小, 平均为 0.162 nm, 而 Al-O 的键长则在 0.174 nm 左右。Si-O 和 Al-O 的 RDF 曲线波峰尖锐, 半高宽较窄, 键长在不同模型间波动很小, 结构较为稳定。在低碱度渣中, 随着 Al_2O_3 含量的增加, Al-O 的配位数保持在 4 左右稳定。区别于高碱度渣, 由于 SiO_2 含量相对较高, 体系复杂程度较高, 稳定性相对较强, 高 Al 配位结构如 $[\text{AlO}_5]^{7-}$ 较少, 整体配位数接近稳定在 4。这也表明了 $[\text{AlO}_4]^{4-}$ 四面体是铝在体系中的主要存在形式。

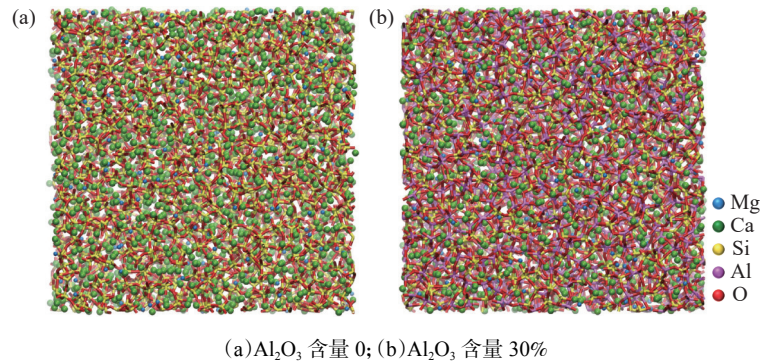


图 2 不同 Al_2O_3 含量的硅铝酸盐渣系的网状结构示意图

Fig. 2 Schematic diagram of the network structure of aluminosilicate slag system with different Al_2O_3 contents

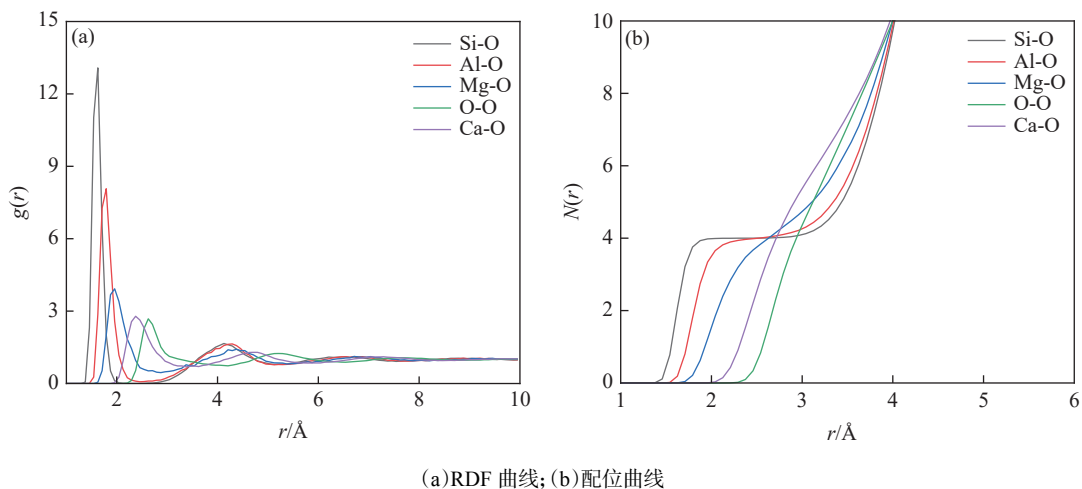


图 3 A6 模型的离子-O 的 RDF 曲线和配位曲线 ($1 \text{ Å} = 0.1 \text{ nm}$)

Fig. 3 RDF curves and coordination curves of ions-O in A6 model

图4展示了不同 Al_2O_3 含量下硅铝酸盐渣系中Si-O和Al-O的配位数变化。对于配位数特征而言,Ca-O和Mg-O的配位平台不如Si-O和Al-O的配位数稳定,离子键结合形式相较于Si-O和Al-O

的共价结构来说稳定性较低,易受到体系成分变化的影响。总体而言, Al_2O_3 含量的变化对CaO-MgO- Al_2O_3 - SiO_2 渣系的RDF和CN特征并没有显著影响,证明了渣系的局部结构特征稳定。

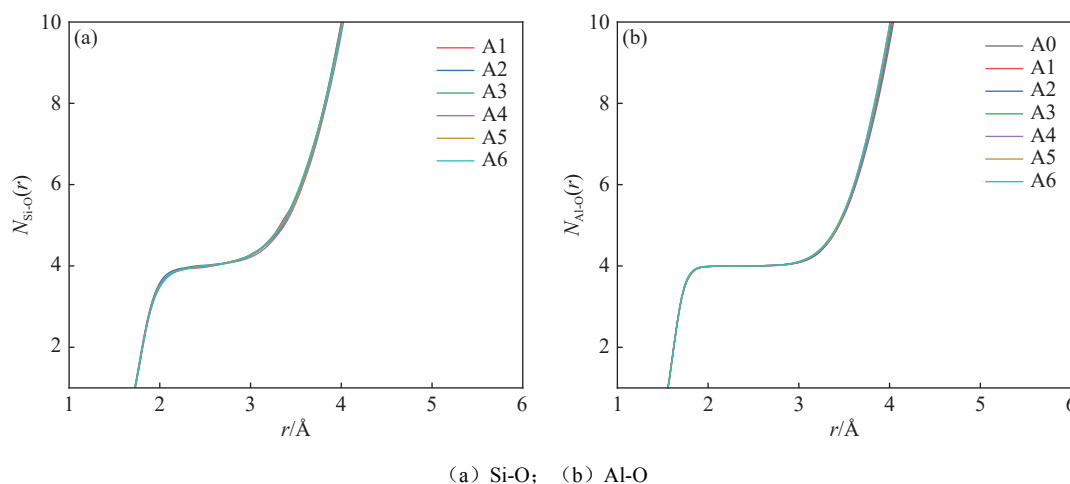


图4 不同 Al_2O_3 含量下硅铝酸盐渣系中Si-O和Al-O的配位数变化

Fig. 4 Changes in coordination number of Si-O and Al-O in aluminosilicate slag systems with different Al_2O_3 contents

2.2 键角分布

在CaO-MgO- Al_2O_3 - SiO_2 渣系中,不同 Al_2O_3 含量对渣系的键角特征的影响如图5所示。O-Si-O键角在不同 Al_2O_3 含量的渣系中平均值约为 109.22° ,这一结果与硅氧四面体结构中理想的四面体几何结

构接近。在这种结构中,Si原子位于中心,四个氧原子位于顶点,形成一个接近理想四面体的几何构型,表明Si在渣系中维持了较为稳定的四面体配位结构。O-Al-O键角的平均值约为 108.67° ,略小于O-Si-O键角。

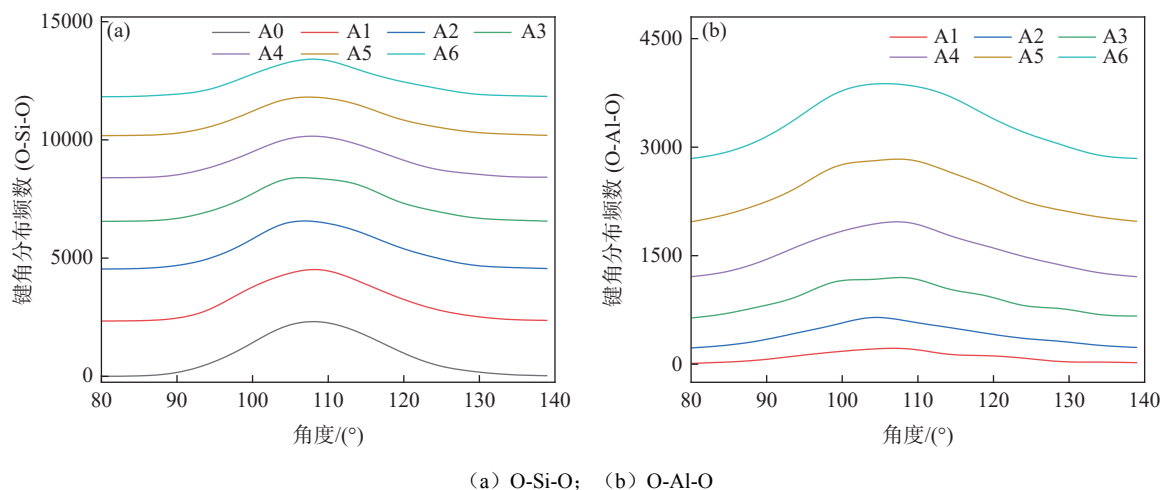


图5 不同 Al_2O_3 含量对渣系的键角特征影响

Fig. 5 Effect of different Al_2O_3 contents on the bond angle characteristics of slag systems

2.3 氧的类型分布

不同 Al_2O_3 含量下渣系中各类氧的含量变化曲线如图6所示。由图6可知,随着 Al_2O_3 含量的增加,自由氧(FO)和非桥氧(NBO)的比例呈降低趋势。当 Al_2O_3 含量从0增长到3%时,FO含量从5.07%降低到2.07%,NBO含量从71.6%降低到36.3%。这一现象显示了 Al_2O_3 的加入导致了更多的氧原子

以配位或桥接的形式存在于渣系中。与此同时,桥氧(BO)和三簇氧(TO)的比例则表现出上升趋势。当 Al_2O_3 含量从0增长到30%时,BO含量从23.3%增长到59.7%,TO含量从0增长到1.9%。具体的各类氧的含量变化曲线如图7所示。

随着 Al_2O_3 含量从0增长到30%,Al-O类型的非桥氧从0增长到12.8%,Si-O类型的非桥氧从

71.6%降低到23.5%, Al-O-Al和Al-O-Si类型的桥氧分别从0增长到15.9%和34.8%,而Si-O-Si的含量从23.3%降低到9%。可以得到,在 Al_2O_3 含量为0时,体系中无TO存在,随着 Al_2O_3 含量增加到15%,体系开始出现以(Al, Al, Al)-O和(Al, Al, Si)-O为主的三配位氧,这说明体系的聚合程度开始向更高的程度转变。总体而言, Al_2O_3 含量的增加显著强化了体系的网络结构。这种结构的变化会影响到渣系的物理化学性质,如黏度、扩散性能等。

2.4 传输特性

在对低碱度CaO-MgO- Al_2O_3 - SiO_2 精炼渣系进行研究的过程中,同时探讨了不同 Al_2O_3 含量对该渣系中离子扩散系数的影响。通过计算均方根位移函数,计算了 Al^{3+} , Si^{4+} , Mg^{2+} , Ca^{2+} , O^{2-} 等离子的扩散系数,如图8所示。观察到 Al^{3+} , Si^{4+} 和 O^{2-} 的扩散系数明显较低,这与它们在渣系中形成的结构较为稳定有关。 Mg^{2+} 和 Ca^{2+} 的扩散系数相对较高,在渣系中作为网络修饰体,在体系中自由存在于网络间隙,离子的迁移率较高,在渣系中的扩散能力较强。总体而言, Al_2O_3 含量的增加对渣系中元素的扩散能力

产生了显著影响,扩散能力的顺序大致为: $\text{Mg}^{2+} > \text{Ca}^{2+} > \text{Al}^{3+} > \text{O}^{2-} > \text{Si}^{4+}$ 。这一顺序反映了不同离子在渣系中的迁移特性和扩散机制。从熔渣整体的扩散系数来看,随着 Al_2O_3 含量从0增长到30%,扩散系数从 $9.18 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ 降低到 $6.07 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$,体系中离子的扩散将受到更多限制。

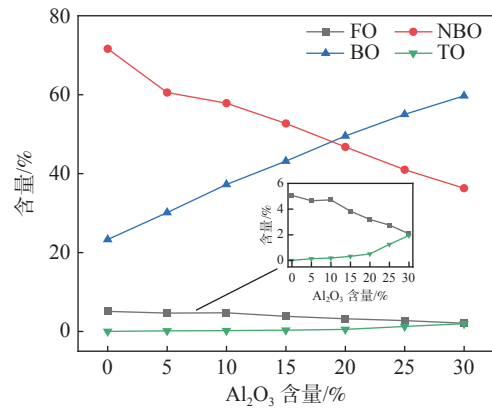


图6 不同 Al_2O_3 含量下硅铝酸盐渣系中各类型氧含量变化
Fig. 6 Changes in the contents of various types of oxygen in aluminosilicate slag systems with different Al_2O_3 contents

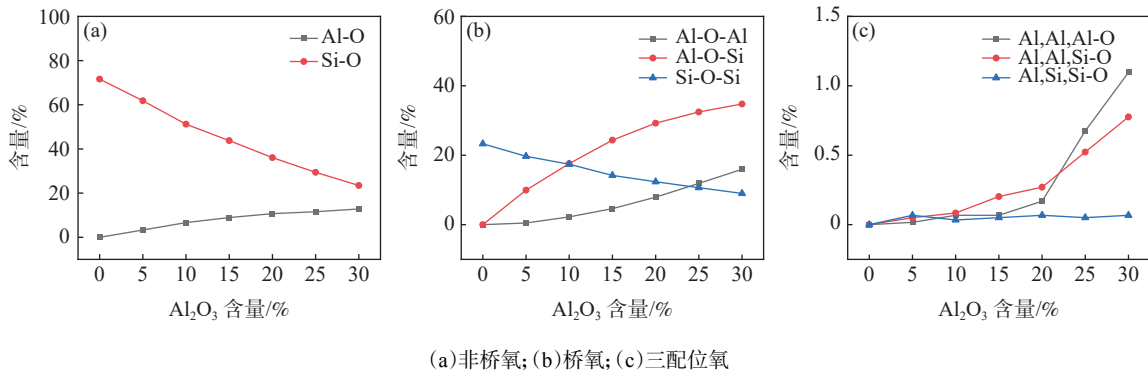


图7 不同 Al_2O_3 含量下硅铝酸盐渣系中各具体类型氧含量变化

Fig. 7 Changes in the contents of specific types of oxygen in aluminosilicate slag systems with different Al_2O_3 contents

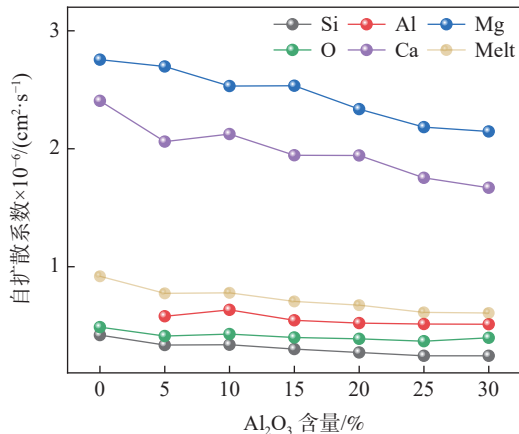


图8 Al_2O_3 含量对体系中离子和熔渣整体扩散系数的影响
Fig. 8 Effect of Al_2O_3 content on the diffusion coefficient of ions and the overall slag in the system

图9为 Al_2O_3 含量对体系局部结构影响的微观示意图。当体系 Al_2O_3 含量为0时,体系结构自由度较高, Si^{4+} 和 Al^{3+} 主要以网络形成体存在于结构中, Ca^{2+} 和 Mg^{2+} 存在于网络间隙中,体系中存在一定数量的自由氧,随着氧含量的增加,体系中的FO数量降低,体系中的聚合结构变得更为复杂,当进一步增加 Al_2O_3 含量时生成了网状结构,这也说明了 Al_2O_3 对体系结构的影响体现在提升体系聚合度和降低体系中离子扩散能力上。

2.5 黏度特性

采用了RNEMD方法、FactSage软件和ZGH模型对渣系黏度进行了计算,结果如图10所示。随着 Al_2O_3 含量从0增长到30%,黏度分别从0.011 Pa·s

增长到 0.017 Pa·s、从 0.153 Pa·s 增长到 0.745 Pa·s 以及从 0.14 Pa·s 增长到 0.51 Pa·s, 均呈现了增长趋势。FactSage 的计算结果中当 Al_2O_3 含量从 25% 增长到 30% 的过程中黏度发生突变增长。结果表

明, 随着 Al_2O_3 含量的增加, 体系聚合度增加, 体系的扩散能力受到限制, 渣系的流动性降低, 最终导致了渣系的黏度降低。即在低碱度渣系中, Al_2O_3 含量的增加会增大体系黏度。

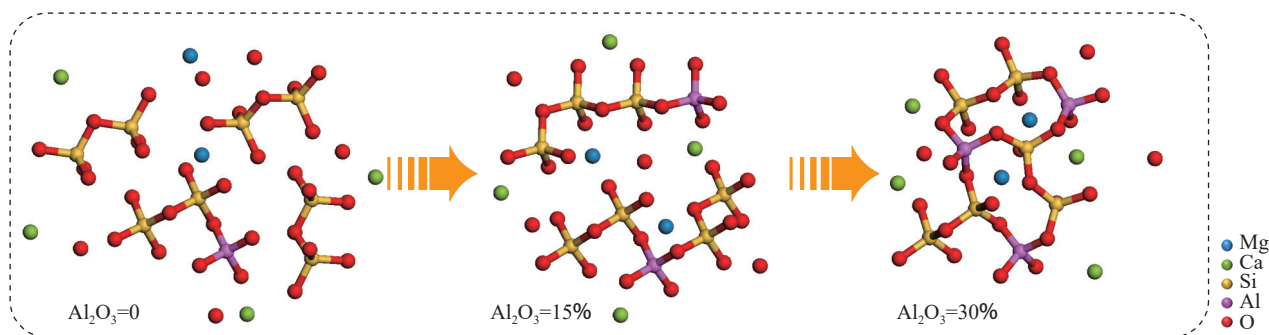


图 9 Al_2O_3 含量对体系局部结构影响微观示意

Fig. 9 Microscopic schematic diagram of the influence of Al_2O_3 content on the local structure of the system

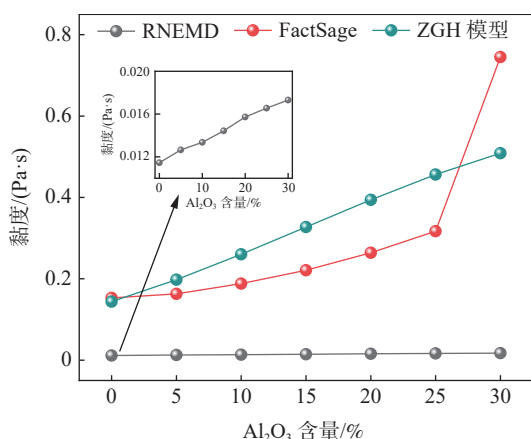


图 10 不同 Al_2O_3 含量对渣系黏度的影响

Fig. 10 Viscosity variation curves of slag systems corresponding to different Al_2O_3 contents

3 结论

通过分子动力学模拟探讨了非铝脱氧采用的低碱度 $\text{CaO-MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ 渣系在不同 Al_2O_3 含量

下的微观结构和物理性质, 主要得出以下结论:

1) Al_2O_3 含量增加时, Si-O 和 Al-O 的径向分布函数、配位数未显著改变, 而 FO 占比从 5.07% 降低到 2.07%, NBO 占比从 71.6% 降低到 36.3%, BO 从 23.3% 增长到 59.7%, TO 从 0 增长到 1.9%。 Al_2O_3 含量改变了氧原子在渣系中的网络结构。

2) 渣中的扩散系数排序为: $\text{Mg}^{2+} > \text{Ca}^{2+} > \text{Al}^{3+} > \text{O}^{2-} > \text{Si}^{4+}$ 。随着 Al_2O_3 含量的增加, 显著降低了低碱度精炼渣系中各元素的扩散系数, 总扩散系数从 $9.18 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ 降低到 $6.07 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$, 这对于解释元素在渣系中的扩散机制具有重要意义。

3) 采用多种模型计算了渣系黏度, 发现 Al_2O_3 含量的增加导致渣系黏度增加, 体系聚合度增加, 这与扩散系数的变化趋势相反。研究结果对于改善炼钢过程中渣的流动性与冶金性能具有指导作用, 并有助于改善精炼渣对夹杂物的调控和钢液洁净度的提升。

参考文献

- [1] WANG Z L, BAO Y P, GU C, *et al.* Control of Ds inclusions in GCr15 bearing steel based on non-aluminum deoxidation process[J]. *Special Steel*, 2022, 43(6): 8-12.
(王仲亮, 包燕平, 顾超, 等. 基于非铝脱氧工艺的 GCr15 轴承钢中 Ds 类夹杂物控制[J]. *特殊钢*, 2022, 43(6): 8-12.)
- [2] XIAO W, BAO Y P, WANG M, *et al.* Inclusions evolution and control of non-aluminum deoxidized GCr15 bearing steel[J]. *Iron and Steel*, 2021, 56(1): 37-42.
(肖微, 包燕平, 王敏, 等. 非铝脱氧 GCr15 轴承钢的夹杂物演变和控制[J]. *钢铁*, 2021, 56(1): 37-42.)
- [3] GU C, WANG Z L, XIAO W, *et al.* Research status and progress on cleanliness of high-fatigue-life bearing steels[J]. *Chinese*

- Journal of Engineering, 2021, 43(3): 299-310.
(顾超, 王仲亮, 肖微, 等. 高疲劳寿命轴承钢洁净度现状及研究进展[J]. 工程科学学报, 2021, 43(3): 299-310.)
- [4] WANG Z L, BAO Y P, GU C, *et al.* Key metallurgical technology for high-quality bearing steel production based on the nonaluminum deoxidation process [J]. Chinese Journal of Engineering, 2022; 44(9): 1607-1619.
(王仲亮, 包燕平, 顾超, 等. 基于非铝脱氧工艺的高品质轴承钢关键冶金技术研究[J]. 工程科学学报. 2022; 44(9): 1607-1619.)
- [5] LIU C W, ZHANG H, CAO L, *et al.* Effect of VD low basicity slag on inclusions of GCr15 bearing steel[J]. Special Steel, 2023, 44(6): 78-82.
(刘春伟, 张昊, 曹磊, 等. VD 低碱度渣对 GCr15 轴承钢夹杂物的影响[J]. 特殊钢, 2023, 44(6): 78-82.)
- [6] MA T W, NIU Z G, BAI Z Y, *et al.* Deoxidation effects of EAF-CAB basic slag treatment on ball-bearing steel[J]. Iron and Steel, 1990(6): 24-29.
(马廷温, 牛正刚, 白增玉, 等. EAF-CAB-低碱度渣处理轴承钢脱氧效果的研究[J]. 钢铁, 1990(6): 24-29.)
- [7] XU T. Research on inclusion control of bearing steel low-basicity slag refining process [D]. Anshan: University of Science and Technology Liaoning, 2021.
(许涛. 轴承钢低碱度渣精炼过程夹杂物控制研究 [D]. 鞍山: 辽宁科技大学 2021.)
- [8] CAO Y R, XU B, WANG Z Z, *et al.* Molecular dynamics simulation of effect of Al_2O_3 on structure and viscosity of molten blast furnace slag[J]. Sintering and Pelletizing, 2022, 47(6): 57-65.
(曹亚然, 徐博, 王铮铮, 等. Al_2O_3 对熔融态高炉渣结构与黏度影响的分子动力学模拟[J]. 烧结球团, 2022, 47(6): 57-65.)
- [9] HU J, YAO M C, ZHONG T, *et al.* Effect of B_2O_3 on Microstructure and transport properties of melt titanium-containing blast furnace slag[J]. Nonferrous Metals, 2024(1): 41-53.
(胡金, 姚明灿, 钟通, 等. B_2O_3 对含钛高炉渣熔体微观结构与输运性质的影响[J]. 有色金属 (冶炼部分), 2024(1): 41-53.)
- [10] SUN T. Microstructure and viscosity characteristics analysis of red mud based microcrystalline glass[D]. Jinan: Shandong Jianzhu University, 2023.
(孙涛. 赤泥基微晶玻璃的微观结构及其粘度特性分析[D]. 济南: 山东建筑大学, 2023.)
- [11] WU T, WANG QIAN, YU C F, *et al.* Structural and viscosity properties of $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-FeO}$ slags based on molecular dynamic simulation[J]. J Non-Cryst Solids, 2016, 450: 23-31.
- [12] GU C, LÜ Z Y, BAO Y P. Size-dependent dissolution behavior of CaO in the $\text{CaO-SiO}_2\text{-FeO}$ slag system: A molecular dynamics study[J]. J Mol Liq, 2022, 367: 120488.
- [13] JIANG C H, LI K J, ZHANG J L, *et al.* Molecular dynamics simulation on the effect of $\text{MgO/Al}_2\text{O}_3$ ratio on structure and properties of blast furnace slag under different basicity conditions[J]. Metall Mater Trans B, 2019, 50: 367-375.
- [14] GU G X, LIU X, ZHANG L L, *et al.* Mixed alkaline earth effect on the structure and elastic modulus of $\text{CaO-MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ glasses: A molecular dynamics simulation[J]. J Non-Cryst Solids, 2023, 600: 122027.
- [15] THOMPSON A P, AKTULGA H M, BERGER R, *et al.* LAMMPS-a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales[J]. Comput Phys Commun, 2022, 271: 108171.
- [16] MÜLLER-PLATHE F. Reversing the perturbation in nonequilibrium molecular dynamics: An easy way to calculate the shear viscosity of fluids[J]. Phys Rev E, 1999, 59(5): 4894.
- [17] ZHANG G H, CHOU K, MILLS K. A structurally based viscosity model for oxide melts[J]. Metall Mater Trans B, 2014, 45: 698-706.