

# 基于分子动力学研究熔渣的微观结构特性

于河<sup>1</sup>, 刘思旸<sup>2\*</sup>, 杨鑫<sup>2</sup>, 刘吉辉<sup>2</sup>, 何志军<sup>2</sup>

<sup>1</sup>辽宁对外经贸学院, 辽宁 大连

<sup>2</sup>辽宁科技大学材料与冶金学院, 辽宁 鞍山

收稿日期: 2022年5月9日; 录用日期: 2022年6月6日; 发布日期: 2022年6月15日

## 摘要

冶金熔炼过程中的非铁组元在升温条件下的粒子迁移及分子尺度的相互作用直接影响着微观粒子之间的反应进程, 进而影响着熔渣宏观物理化学性质。本文利用分子动力学计算分析CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO(-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)熔渣体系的高温结构, 并通过计算偏径向分布函数分析Ca-O、Mg-O、Si-O及Al-O的键长。结果表明: 相较于Si-O和Al-O来说, Ca-O和Mg-O空间扩散速度较快, 活跃能力更强。键长关系为Ca-O > Mg-O > Al-O > Si-O, 且由于Ca-O、Mg-O的键长较大, 反应势垒较小, 使得Ca-O、Mg-O高温反应性好; CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO体系中加入Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>时, 因[AlO<sub>4</sub>]<sup>5-</sup>微观网络结构和反应特性与[SiO<sub>4</sub>]<sup>4-</sup>相近, 可以部分地替代[SiO<sub>4</sub>]<sup>4-</sup>与碱性氧化物发生反应, 导致Si-O的键长变短。通过红外光谱对熔渣结构进行了表征, 红外光谱分析在一定程度上验证了分子动力学模拟结果的准确性。在CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO熔渣体系加入Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>会加快微观粒子的扩散速率, 以此改变了多元体系内部化学反应的进行。

## 关键词

粒子迁移, 分子动力学计算, 键长, 界面反应过程

# Research on the Microstructure Characteristics of Molten Slag Based on Molecular Dynamics

He Yu<sup>1</sup>, Siyang Liu<sup>2\*</sup>, Xin Yang<sup>2</sup>, Jihui Liu<sup>2</sup>, Zhijun He<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Liaoning University of International Business, Dalian Liaoning

<sup>2</sup>School of Materials and Metallurgy, University of Science and Technology Liaoning, Anshan Liaoning

Received: May 9<sup>th</sup>, 2022; accepted: Jun. 6<sup>th</sup>, 2022; published: Jun. 15<sup>th</sup>, 2022

\*通讯作者。

文章引用: 于河, 刘思旸, 杨鑫, 刘吉辉, 何志军. 基于分子动力学研究熔渣的微观结构特性[J]. 冶金工程, 2022, 9(2): 113-121. DOI: 10.12677/meng.2022.92015

## Abstract

The metallurgy reaction process was influenced directly by the particle migration and the interaction with the molecule scale of the non-ferrum component in the smelting process when the temperature was increased. In this paper, molecular dynamics calculations are used to analyze the high temperature structure of the CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO (-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) slag system, and the bond lengths of Ca-O, Mg-O, Si-O and Al-O are analyzed by calculating the partial radial distribution function. The results show that compared with Si-O and Al-O, Ca-O and Mg-O have a faster spatial diffusion rate and a stronger active capacity. The bond length relationship is Ca-O > Mg-O > Al-O > Si-O, and because the bond length of Ca-O and Mg-O is larger, the reaction barrier is smaller, which makes Ca-O and Mg-O have good reactivity at high temperature. When Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> is added to the system, because [AlO<sub>4</sub>]<sup>5-</sup> microscopic network structure and reaction characteristics are similar to [SiO<sub>4</sub>]<sup>4-</sup>, it can partially replace [SiO<sub>4</sub>]<sup>4-</sup> and react with alkaline oxides, resulting in shorter Si-O bond length. The structure of molten slag was characterized by infrared spectroscopy, which verified the accuracy of molecular dynamics simulation results to a certain extent. Adding Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> to the CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO slag system will accelerate the diffusion rate of microscopic particles and promote the progress of chemical reactions in the multi-element system.

## Keywords

Particle Migration, Molecular Dynamic Calculations, Bond Length, Interface L Reaction Process

Copyright © 2022 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

铁矿石高温熔炼过程中形成的冶金熔渣主要的成分是 CaO、MgO、SiO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [1] [2]。熔渣组元的百分含量及组元间的反应行为决定着熔渣的黏度、脱硫能力等物理化学性质，同时影响熔渣与金属间的质量、热量的传输，进而直接影响着冶金过程的进行[3] [4] [5] [6]。国内外有很多关于 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的百分含量对炉渣性能的解析，一些研究聚焦在 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 含量变化对相平衡及液相生成量的影响，进而分析炉渣的高温流动性的变化[7] [8]。另有一些关于不同 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 含量的熔渣下降过程中润湿能力方面的研究，并同时使用扫描电镜等检测手段分析界面处的变化[9]-[14]。也有对炉渣的结构模型进行了研究，包括离子结构理论、共聚团结构理论等，有的研究人员认为高炉渣应属于硅酸盐体系，[AlO<sub>4</sub>]<sup>5-</sup>和[SiO<sub>4</sub>]<sup>4-</sup>由于聚合作用连接成熔体的网络结构，并且把熔渣中的氧分为桥氧、非桥氧和自由氧，并通过拉曼、红外等检测的特征峰进行分峰处理来分析炉渣的微观结构，并重点关注 SiO<sub>2</sub> 的各种结构单元的存在形式及可能的转化[15] [16] [17]。关于 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的研究目前更多的则是关注在高铝矿的使用量不断增加的情况下，如何通过调节镁铝比、碱度值进而来保证炉渣的黏度等各项性能能够满足高炉生产的要求[18] [19] [20]。

近些年兴起的分子动力学等模拟计算被广泛用于微粒的微观结构的剖析，推动了冶金领域对熔渣微观粒子结构及反应过程的研究进展[21] [22] [23] [24] [25]。然而有关熔渣微观反应的具体的元素的迁移过程及粒子间的相互作用、空间的排列分布、运动规律以及粒子结构变化方面的研究却相对较少。本文通过(Materials Studio, 简称 MS)软件进行模拟计算分析，探究冶金熔渣的微观粒子的内部结构和组织状态随着高温的变化，从而揭示微观粒子尤其是 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 高温迁移过程的实质，以及其对高炉渣主要组分反应

进程的影响, 从而为炉渣宏观性质的研究提供基础理论的支持。

## 2. 分子动力学(MD)计算与分析

### 2.1. 多组分渣体系显微结构计算

采用(Materials Studio, 简称 MS)软件进行模拟计算分析, 以硅氧四面体为核心, 根据微观粒子个数比建立初始模型, 高温构型完成之后进一步进行均方位移、径向分布函数等数据计算, 初始模型使用的 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO 渣体系的化学成分如表 1 所示。在碱度不变的条件下向 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO 渣体系加入 13% Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 并对 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 渣体系进行分子动力学计算, 试样的粒子数的比例如表 2 所示。按照表 2 的粒子的比例数进行建模, 对 4 个试样的初始模型进行 5 × 5 × 5 的超晶胞创建, 以红色代表 O、蓝色代表 Mg、绿色代表 Ca、黄色代表 Si、粉色代表 Al, 并对模型进行结构优化, 然后选择 NVT 系综, 步长数为 60,000 步, 模型分别在 1373 K、1473 K、1573 K、1673 K、1773 K 进行动力学计算, 最后根据高温结构计算了偏径向分布函数和键长, 偏径向分布函数的表达式如下:

$$g_{ij}(r) = \frac{V}{N_i N_j} \sum_j \frac{n(r)}{4\pi r^2 \Delta r} \quad (1)$$

其中,  $N_i$  和  $N_j$  表示  $i$  粒子和  $j$  粒子的总数,  $V$  为体系的体积,  $n(r)$  为距离原点  $r$  到  $r + \Delta r$  之间的平均原子数。当一个体系内所有粒子呈随机分布时, 将不存在距离上的有序性, 则  $g(r)$  为 1。

**Table 1.** The chemical composition of the sample, wt%

**表 1.** 样品的化学成分, wt%

NUM	CaO	SiO <sub>2</sub>	MgO	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
1 <sup>#</sup>	48.05	30.97	11.98	—
2 <sup>#</sup>	42	35	10	13

**Table 2.** Atom quantity computation and ratio

**表 2.** 原子数量计算及比例

Ca	Si	Mg	Al	O	Ratio
$1.55 \times 10^{25}$	$1.20 \times 10^{25}$	$5.37 \times 10^{24}$	—	$4.49 \times 10^{25}$	3:2:1:8
$1.35 \times 10^{25}$	$1.05 \times 10^{25}$	$4.48 \times 10^{24}$	$4.61 \times 10^{24}$	$4.60 \times 10^{25}$	3:2:1:1:10

### 2.2. 多组分渣体系显微结构计算结果与分析

对 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO 体系和 CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub> 体系的计算模型如图 1、图 2 所示。由图 1、图 2 可知, 当温度在 1473 K 时, 体系内的微观粒子主要在原位置附近振动, 移动的距离很小, 此时物质开始熔化, 但是晶胞还是进步维持着原来的结构, 从化学反应的角度讲, 反应主要在各晶胞的内部开始, 只有在晶界的位置才有接触性反应, 随着温度的升高, Ca<sup>2+</sup>、Mg<sup>2+</sup>逐渐离开原来的位置向周围的晶胞移动, 并且原来的网络结构也逐步的被破坏。可见随着温度的升高, 粒子吸收到足够的热量时就会离开原来的平衡位置发生快速的迁移, 宏观上的溶解、吸附和化学反应就会持续的进行, 其中具有网络结构的[SiO<sub>4</sub>]<sup>4-</sup>和[AlO<sub>4</sub>]<sup>5-</sup>移动能力相对较差, 而 Ca<sup>2+</sup>、Mg<sup>2+</sup>离子相同条件下的移动距离较大, 在力场和升温条件下较容易扩散到周围空间内, 且在 1673 K 到 1773 K 之间是物质发生迁移速度最快的区间。此外 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的加入提高了 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO 三元体系的反应活性, 促进粒子在相同的条件下发生化学反应, 四元体系发生剧烈的化学反应的温度要比三元体系低, 并且 1673~1773 K 是粒子进行移动即化学反应的活跃温度段。

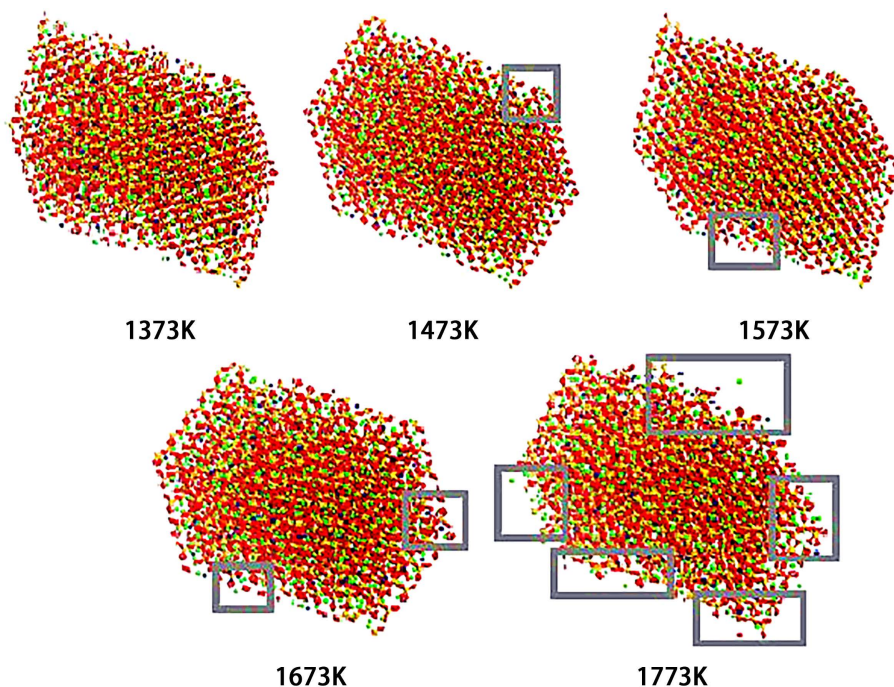


Figure 1. The CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO system microstructure change with the increasing of temperature  
图 1. CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO 体系不同温度的动力学计算模型

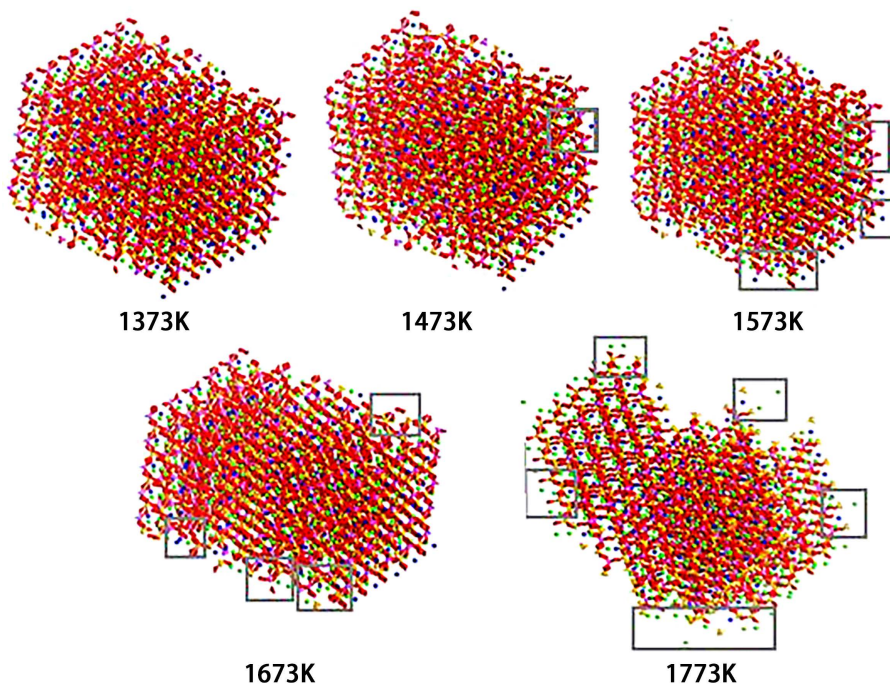
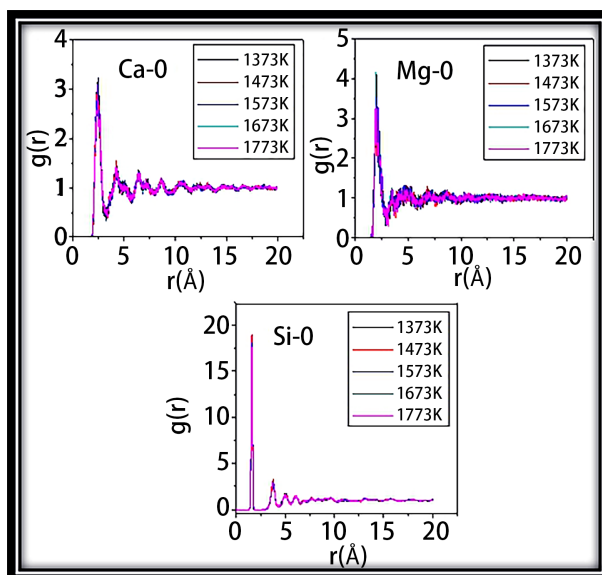


Figure 2. The CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system microstructure change with the increasing of temperature

图 2. CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 体系不同温度的动力学计算模型

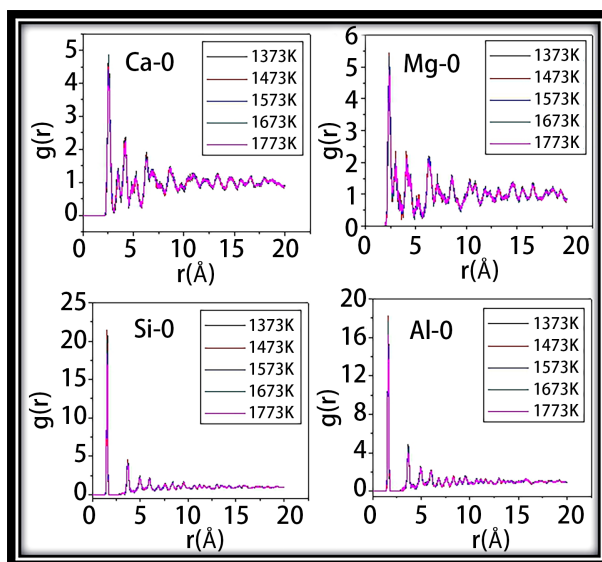
### 2.3. 多元体系的径向分布函数及键长计算结果

利用 MS 软件进行了各组分的偏径向分布函数，计算结果如图 3、图 4 所示。



**Figure 3.** The partial radial distribution function of the CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO system

**图 3.** CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO 体系不同温度的偏径向分布函数



**Figure 4.** The partial radial distribution function of the CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system

**图 4.** CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 体系不同温度的偏径向分布函数

图 3、图 4 示出了不同温度条件下 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO 体系和 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 体系的各粒子的偏径向分布函数，从图上发现各粒子不同温度时的偏径向分布函数几乎都是重叠在一起的，可见温度的变化对偏径向分布函数的影响并不是很明显，但是 Si-O 和 Al-O 的  $g(r)$  值均大于 15 以上，远远高于 Ca-O 和 Mg-O 的  $g(r)$  值。根据各组元偏径向分布函数的第一峰所对应的  $r(\text{Å})$  值，可得到各组分的键长值如图 5 所示。

由图 5 可知，无论是三元 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO 体系还是四元 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 体系，Ca-O 键长最大，Mg-O 次之，Si-O 最小，即 Ca-O > Mg-O > Si-O。当三元 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO 体系添加了 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 后，Ca-O 和

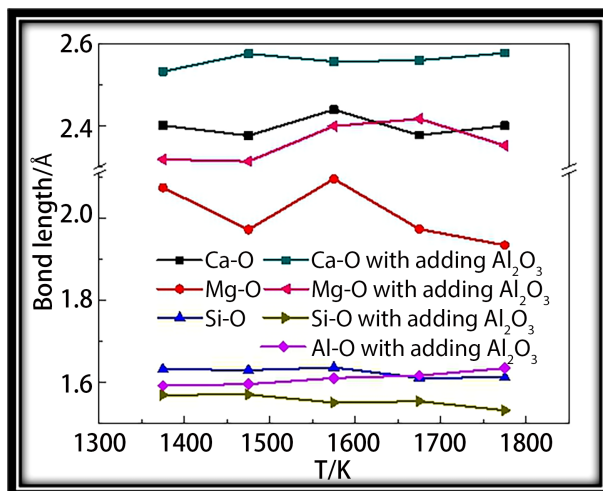


Figure 5. The bond length calculation results of the multiple slag system under different temperature conditions

图 5. 多元渣系不同温度条件下的键长计算结果

Mg-O 的键长增加, 而 Si-O 键长则减小, 且随着温度的增加, 四元体系 Si-O 键长减小的趋势更加明显, 例如在 1773 K 时 Si-O 键长由 1.61 Å (未加入 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) 减小至 1.53 Å (加入 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)。此外在 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 四元体系中 Al-O 键长与 Si-O 非常接近, 原因在于 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 与 SiO<sub>2</sub> 有相似的网络结构, 在熔渣体系中可形成网络结构 [AlO<sub>4</sub>]<sup>5-</sup>, 在高温反应过程中可以部分的替代 SiO<sub>2</sub>, 但 [AlO<sub>4</sub>]<sup>5-</sup> 稳定性较 [SiO<sub>4</sub>]<sup>4-</sup> 小。键长越大, 结合力越小, 键能越小, 反应所需能量降低, 且随着温度的升高, X-O 键解离所需的能量越小, 高温反应性好。Ca-O 和 Mg-O 键长相对较长, 化学反应的反应势垒较小, 且在高温下可电离, Mg<sup>2+</sup> 和 Ca<sup>2+</sup> 容易解聚环状和更高的网络结构。当 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 加入 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO 体系时, 形成网络结构 [AlO<sub>4</sub>]<sup>5-</sup>, 加剧了 Ca-O 和 Mg-O 的解离, 由此 Ca-O 和 Mg-O 的键长大幅增加, 同时 Ca-O 和 Mg-O 的解离所提供的自由 O<sup>2-</sup> 离子解聚了更容易反应的网络结构 [AlO<sub>4</sub>]<sup>5-</sup>, 相对来说 [SiO<sub>4</sub>]<sup>4-</sup> 变得稳定, Si-O 键长减小。高温条件下, 熔渣粒子所获得的能量逐渐增加, 粒子在晶胞与晶胞界面上接触并发生复杂的动态变化, 粒子原有的化学键被拉断而重新组合, 改变晶胞参数, 晶胞扭曲变形, 晶体变由团簇甚至是离子结构, 开始产生高温迁移, 径向分布函数尖峰变宽以致消失, 晶体的长程有序取代了非晶态的短程有序。熔渣微观结构的变化影响着炉渣的黏度和流动性, 从而影响渣金之间的各种传输现象和化学反应的进行。

### 3. 红外光谱分析

将不同含量的 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (13%~17%) 加入 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO 熔渣体系, 并对 CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 熔渣在 1773 K 急冷后的试样用红外光谱进行结构实验表征, 探究不同含量的 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 对熔渣结构的影响, 以此验证分子动力学计算结果。表 3 为红外光谱的特征振动谱段及其对应的硅酸盐结构单元, 图 6 示出了不同 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 质量分数下四元熔渣的红外光谱在波数 1200~800 cm<sup>-1</sup> 内的分峰结果, 各四面体结构对应峰中心位置波数如表 4 所示。

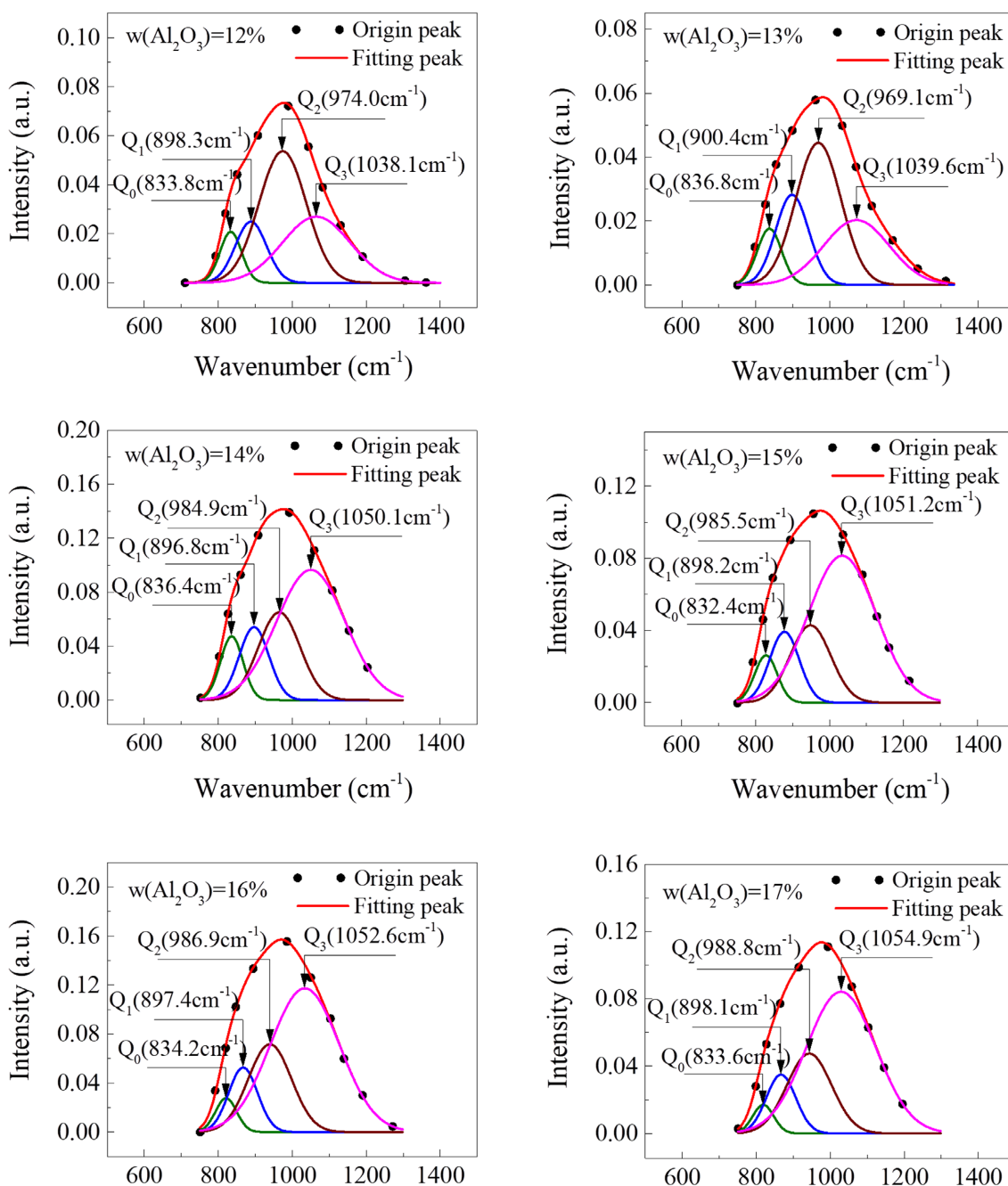
Table 3. Infrared active vibrational spectrum and the corresponding silicate and aluminate structure unit

表 3. 红外光谱的特征振动谱段及其对应的硅酸盐及铝酸盐结构单元

结构单元	连接形式	Q <sub>n</sub>	波数(cm <sup>-1</sup> )	振动模式
Si <sub>2</sub> O <sub>5</sub> <sup>2-</sup>	面状	Q <sub>3</sub>	1100~1050	对称伸缩
Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub> <sup>4-</sup>	链、环状	Q <sub>2</sub>	980~950	对称伸缩

Continued

$\text{Si}_2\text{O}_7^{6-}$	双聚体	$Q_1$	920~900	对称伸缩
$\text{Si}_2\text{O}_4^{4-}$	单聚体	$Q_0$	880~850	对称伸缩
$\text{AlO}_4^{5-}$			720~630	反对称弯曲
$\text{AlO}_6^{9-}$			570~520	反对称弯曲
Si-O-Al			500	对称弯曲

Figure 6. Deconvoluted results of the FTIR curves with the various  $w(\text{Al}_2\text{O}_3)$ 图 6. 不同  $\text{Al}_2\text{O}_3$  质量分数下熔渣红外光谱分峰结果

**Table 4.** The peaks center position of each tetrahedron structure under different  $\omega(\text{Al}_2\text{O}_3)$ **表 4.** 不同  $\text{Al}_2\text{O}_3$  质量分数下各四面体结构对应峰中心位置

$\omega(\text{Al}_2\text{O}_3)$ (%)	各四面体结构对应峰中心波数( $\text{cm}^{-1}$ )			
	$Q_0$	$Q_1$	$Q_2$	$Q_3$
12	833.8	898.3	974.0	1038.1
13	836.8	900.4	969.1	1039.6
14	836.4	896.8	984.9	1050.1
15	832.4	898.2	985.5	1051.2
16	834.1	897.4	986.9	1052.6
17	833.6	898.1	988.8	1054.9

由图 6 和表 4 可知, 随  $\text{Al}_2\text{O}_3$  质量分数的增加,  $Q_0$  和  $Q_1$  结构对应峰中心位置波数变化不明显, 分别维持在  $834.8 \text{ cm}^{-1}$  和  $898.2 \text{ cm}^{-1}$  左右。  $Q_2$  和  $Q_3$  结构对应峰中心位置波数随  $\text{Al}_2\text{O}_3$  质量分数的增加逐渐向高波数区移动, 分别由  $974.0 \text{ cm}^{-1}$  增加至  $988.8 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1038.1 \text{ cm}^{-1}$  增加至  $1054.9 \text{ cm}^{-1}$ , 表明在炉渣结构中  $Q_2$  和  $Q_3$  结构单元稳定性随  $\text{Al}_2\text{O}_3$  质量分数增加而增强, 有向复杂结构变化的趋势。这是因为在此实验条件下炉渣结构中以四配位铝形式存在的  $[\text{AlO}_4]^{5-}$  四面体结构单元增多, 而以四配位铝形式存在的  $\text{Al}_2\text{O}_3$  表现为酸性, 在炉渣结构中为网络形成子, 因此增加  $\text{Al}_2\text{O}_3$  含量会占据硅氧四面体中的部分非桥氧, 同时  $\text{Al}^{3+}$  代替  $\text{Si}^{4+}$  形成更多的  $\text{Si-O-Al}$  结构单元, 另外,  $[\text{AlO}_4]^{5-}$  四面体结构单元需要消耗  $\text{CaO}$ 、 $\text{MgO}$  用于电荷补偿, 使得炉渣结构中  $\text{CaO}$ 、 $\text{MgO}$  反应更加活跃。红外光谱对熔渣结构的表征结果很好地验证了分子动力学分析的准确性。

#### 4. 结论

用分子动力学计算分析  $\text{CaO-SiO}_2\text{-MgO(-Al}_2\text{O}_3)$  熔渣体系的高温结构, 并通过计算偏径向分布函数分析  $\text{Ca-O}$ 、 $\text{Mg-O}$ 、 $\text{Si-O}$  及  $\text{Al-O}$  的键长。得出以下结论:

1) 相较于  $\text{Si-O}$  和  $\text{Al-O}$  来说,  $\text{Ca-O}$  和  $\text{Mg-O}$  空间扩散速度较快, 活跃能力更强。键长大小关系为  $\text{Ca-O} > \text{Mg-O} > \text{Al-O} > \text{Si-O}$ , 且由于  $\text{Ca-O}$ 、 $\text{Mg-O}$  的键长较大, 反应势垒较小, 使得  $\text{Ca-O}$ 、 $\text{Mg-O}$  高温反应性好。

2)  $\text{CaO-SiO}_2\text{-MgO}$  熔渣体系中加入  $\text{Al}_2\text{O}_3$  时, 因  $[\text{AlO}_4]^{5-}$  微观网络结构和反应特性与  $[\text{SiO}_4]^{4-}$  相近, 可以部分地替代  $[\text{SiO}_4]^{4-}$  与碱性氧化物发生反应, 导致  $\text{Si-O}$  的键长变短。在  $\text{CaO-SiO}_2\text{-MgO}$  熔渣体系加入  $\text{Al}_2\text{O}_3$  会加快微观粒子的扩散速率, 以此促进多元体系内部化学反应的进行。通过红外光谱对熔渣结构进行表征, 验证了分子动力学分析的准确性。

#### 基金项目

国家自然科学基金项目资助(52104331, 51874171)。

#### 参考文献

- [1] 吕学伟, 严志明, 庞正德, 白晨光, 梁栋, 谢皓.  $\text{Al}_2\text{O}_3$  对高炉渣物化性能和结构影响研究综述[J]. 钢铁, 2020, 55(2): 1-10.
- [2] Bouaziz, A., Hamzaoui, R., Guessasma, S., Lakhali, R., Achoura, D. and Leklou, N. (2017) Efficiency of High Energy over Conventional Milling of Granulated Blast Furnace Slag Powder to improve Mechanical Performance of Slag Cement Paste. *Powder Technology*, **308**, 37-46. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.12.014>



- [3] 张淑会, 穆红旺, 孙艳芹, 吕庆. 高铝中钛高炉渣脱硫的动力学机制[J]. 钢铁, 2012, 47(8): 13-16.
- [4] 谢皓, 王劲松, 邹忠平, 王刚, 徐小辉. 高炉炉渣脱硫能力分析[J]. 中国冶金, 2014, 24(12): 47-50.
- [5] Gan, M., Fan, X., Ji, Z.Y., Chen, X., Yin, L., Jiang, T., *et al.* (2015) High Temperature Mineralization Behavior of Mixtures during Iron Ore Sintering and Optimizing Methods. *ISIJ International*, **55**, 742-750. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.55.742>
- [6] Hayashi, M., Suzuki, K., Maeda, Y. and Watanabe, T. (2016) Effects of  $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$  and  $2\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3\cdot\text{SiO}_2$  on Primary Slag Melting of Sinters in the Cohesive Zone of a Blast Furnace. *ISIJ International*, **56**, 220-225. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.ISIJINT-2015-461>
- [7] Kim, H., Wan, H.K., Sohn, I. and Min, D.J. (2010) The Effect of MgO on the Viscosity of the CaO-SiO<sub>2</sub>-20 wt%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgO Slag System. *Steel Research International*, **81**, 261-264. <https://doi.org/10.1002/srin.201000019>
- [8] Ma, X.D., Wang, G., Wu, S.L., Zhu, J. and Zhao, B. (2015) Phase Equilibria in the CaO-SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgO System with CaO/SiO<sub>2</sub> Ratio of 1.3 Relevant to Iron Blast Furnace Slags. *ISIJ International*, **55**, 2310-2317. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.ISIJINT-2015-263>
- [9] Oh, J.S. and Lee, J. (2015) Composition-Dependent Reactive Wetting of Molten Slag on Coke Substrates. *Journal of Materials Science*, **51**, 1813-1819. <https://doi.org/10.1007/s10853-015-9588-6>
- [10] Wu, C., Cheng, G. and Ma, Q. (2014) Calculating Models on the Surface Tension of CaO-FeO-SiO<sub>2</sub> Molten Slags. *Research of Materials Science*, **3**, 10-16.
- [11] Yang, X., He, Z.J., Yu, J.K., Zhang, Y., Yuan, L. and Mao, F. (2020) Influence of Interface Electric Field on Interaction between Molten Iron and Refractory Interface. *Ceramics International*, **46**, 10180-10185. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.01.009>
- [12] Sahajwalla, V., Khanna, R. and Mehta, A.S. (2004) Influence of Chemical Compositions of Slag and Graphite on the Phenomena Occurring in the Graphite/Slag Interfacial Region. *Metallurgical & Materials Transactions B*, **35**, 75-83. <https://doi.org/10.1007/s11663-004-0098-1>
- [13] Kim, H.-S., Kim, J.G. and Yasushi, S. (2010) The Role of Molten Slag in Iron Melting Process for the Direct Contact Carburization: Wetting and Separation. *ISIJ International*, **50**, 1099-1106. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.50.1099>
- [14] Cheng, G. and Liao, N. (1999) Calculation Model for Surface Tension of Slag Melt. *Journal of Iron and Steel Research International*, **6**, 17-20.
- [15] 严照照, 张淑会, 张淑卿, 董晓旭, 郗亚娜. 高炉渣微观结构对其冶金性能的影响[J]. 钢铁钒钛, 2017, 38(4): 123-129.
- [16] Sun, Y.Q. and Zhang, Z.T. (2015) Structural Roles of Boron and Silicon in the CaO-SiO<sub>2</sub>-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Glasses Using FTIR, Raman, and NMR Spectroscopy. *Metallurgical and Materials Transactions B*, **46**, 1549-1554. <https://doi.org/10.1007/s11663-015-0374-2>
- [17] Han, S.M., Park, J.G. and Sohn, I. (2011) Surface Kinetics of Nitrogen Dissolution and Its Correlation to the Slag Structure in the CaO-SiO<sub>2</sub>, CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, and CaO-SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Slag System. *Journal of Non-Crystalline Solids*, **357**, 2868-2875. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2011.03.023>
- [18] Rajavaram, R., Kim, H., Lee, C.-H., Cho, W.-S., Lee, C.H. and Lee, J. (2017) Effect of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Concentration on Density and Structure of (CaO-SiO<sub>2</sub>)-xAl<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Slag. *Metallurgical & Materials Transactions B*, **48**, 1596-1603. <https://doi.org/10.1007/s11663-017-0964-2>
- [19] 常治宇, 张建良, 许仁泽, 焦克新, 白兴全, 韩旺学. Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>对酒钢低铝渣黏度的影响及热力学分析[J]. 中国冶金, 2018, 28(8): 6-9+27.
- [20] 李强, 潘涛, 张翰洋, 丁浩. 高铝熔渣物相析出演变规律研究[J]. 东北大学学报, 2018, 39(7): 995-999.
- [21] Song, P. and Wen, D. (2010) Molecular Dynamics Simulation of the Sintering of Metallic Nanoparticles. *Journal of Nanoparticle Research*, **12**, 823-829. <https://doi.org/10.1007/s11051-009-9718-7>
- [22] 江露. CaO-SiO<sub>2</sub>-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-FeO 熔渣结构与粘度的基础研究[D]: [硕士学位论文]. 重庆: 重庆大学, 2015.
- [23] 王浩男, 玄伟伟, 夏德宏. 不同温度下煤灰熔渣的结构演变规律[J]. 化工学报, 2019, 70(8): 3094-3103.
- [24] 张晓博, 刘承军, 姜茂发. CaF<sub>2</sub>对CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-CaF<sub>2</sub>熔体结构影响的分子动力学研究[J]. 东北大学学报, 2020, 41(4): 510-515.
- [25] 刘克, 韩毅华, 杨帆, 等. MgO对CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>基四元系保护渣熔渣微结构的影响[J]. 钢铁, 2020, 55(5): 52-58.