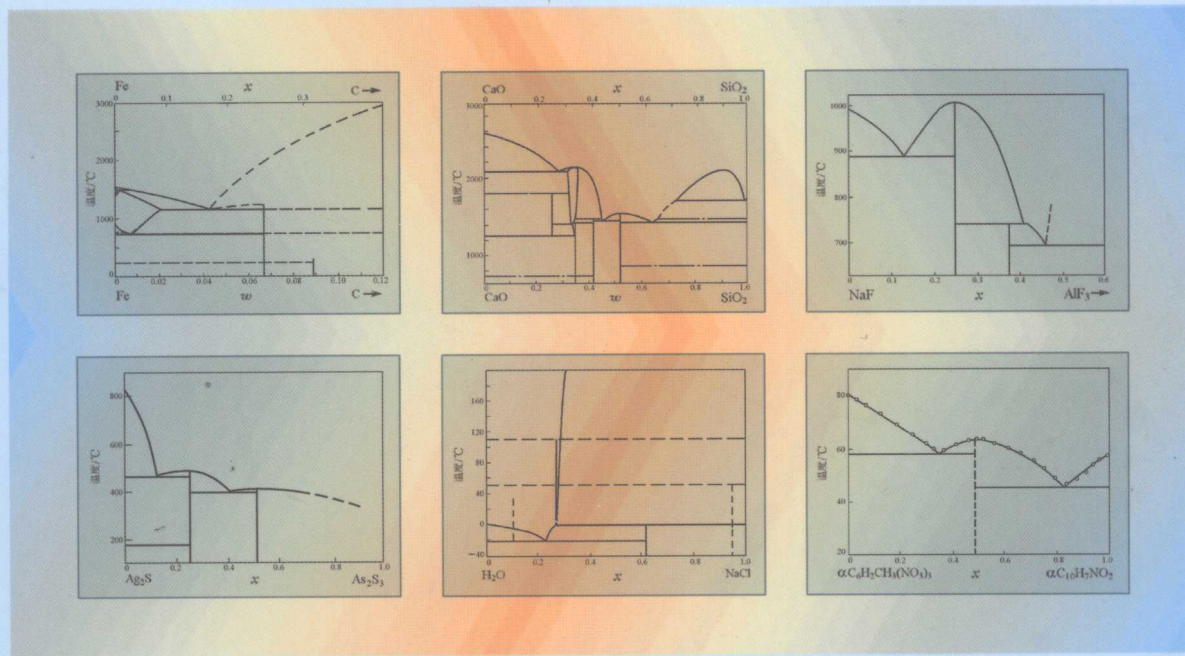




# 冶金熔体和溶液的计算热力学

张鉴 著

$$a_i, a_j \longrightarrow \Delta G^\ominus = -RT \ln K$$



$$K, \Delta G^\ominus, L_i$$

$$N_i = a_i, \Delta G^m, \Delta H^m, \Delta S^m$$

$$N_j = a_j$$



冶金工业出版社

<http://www.cnmp.com.cn>

中华人民共和国新闻出版总署“三个一百”原创图书  
“十一五”国家重点图书  
国家科学技术学术著作出版基金资助出版

# 冶金熔体和溶液的计算热力学

Computational Thermodynamics of Metallurgical Melts and Solutions

---

金属熔体·炉渣熔体·熔盐·熔铕·水溶液·  
有机溶液·总结、计算方法和程序

张 鉴 著

北 京  
冶 金 工 业 出 版 社  
2007

## 内 容 提 要

冶金熔体和溶液的热力学研究,是深入研究冶金过程的重要理论基础,在进一步开发冶金流程、冶金工艺、冶金产品方面具有重要的应用价值。

本书分金属熔体、炉渣熔体、熔盐和熔硫、水溶液和有机溶液、冶金熔体和溶液计算热力学总结及计算方法和程序共五部分,系统地介绍了作者提出的“冶金熔体和溶液的计算热力学”新理论体系。这个新理论体系从相图中已被确定的结构单元出发,以实测活度为依据和实践检验标准,以质量作用定律为准绳和理论检验标准,对47年来课题组在金属熔体、炉渣熔体、熔盐、熔硫、水溶液和有机溶液热力学性质方面的研究成果进行全面总结;提出了金属熔体的原子和分子共存理论及兼并规律、熔渣和水溶液的分子和离子共存理论、熔盐和熔硫的正负离子未分开模型以及有机溶液的全分子模型;用作用浓度代替活度,避免了不易确定的经验参数和活度系数计算,解决了冶金理论中长期存在的平衡常数计算方面的争议,成功地解决了六类溶液的活度计算问题,并在世界上首先初步完成了用质量作用定律统一溶液理论这个艰巨的工程。

本书可作为冶金院校研究生选修课的教材,也可作为冶金科研院所、大专院校师生、冶金企业和设计单位工程技术人员的参考用书,对化工方面的科技人员也有参考价值。

### 图书在版编目(CIP)数据

冶金熔体和溶液的计算热力学/张鉴著. —北京:冶金工业出版社,2007.3

ISBN 978-7-5024-4164-7

I.冶… II.张… III.熔融金属—热力计算 IV.TF02

中国版本图书馆CIP数据核字(2007)第013251号

出 版 人 曹胜利(北京沙滩嵩祝院北巷39号,邮编100009)

责任编辑 刘小峰(010-64027931;forrest\_liuxf@sohu.com)

美术编辑 李 心 责任校对 刘 倩 李文彦 责任印制 丁小晶

ISBN 978-7-5024-4164-7

北京百善印刷厂印刷;冶金工业出版社发行;各地新华书店经销

2007年3月第1版,2007年3月第1次印刷

787mm×1092mm 1/16; 36印张; 870千字; 552页; 1-1500册

128.00元

冶金工业出版社发行部 电话:(010)64044283 传真:(010)64027893

冶金书店 地址:北京东四西大街46号(100711) 电话:(010)65289081

(本社图书如有印装质量问题,本社发行部负责退换)

## 本书著者

张 鉴 成国光 王力军 朱 荣 郭汉杰

## 前 言

1864年,古尔德伯格(Guldberg)和瓦戈(Waage)提出了质量作用定律,指出化学反应的平衡常数只随温度而改变,而与生成物或反应物的浓度无关。这个定律是进行化学平衡计算的根本规律,它为研究冶金熔体和溶液结构提供了广阔的前景和可能性。长期以来冶金工作者正是围绕着如何将质量作用定律运用于冶金过程而开展工作的。冶金熔体和溶液不同模型的演变过程,正体现了人们认识客观规律的不断深化过程。

冶金熔体包括金属熔体、炉渣熔体、熔盐和熔盐,它们是冶金过程赖以进行的中间产物和精炼剂,因此引起冶金工作者研究的广泛兴趣,提出的理论和模型也是多种多样的。就熔渣而言,首先人们提出了分子理论,正确地肯定了熔渣中有分子存在的事实,并用自由氧化物的概念解释了炉渣脱硫、脱磷能力的变化原因。在这方面做出贡献的有申克(H. Schenk)和启普曼(J. Chipman)等。由于无法解释熔渣导电和电解及不能解决平衡常数不守常的缺点,另外一些学者又提出了离子理论,正确地肯定了熔渣中存在离子的事实,并定性地解释了不少冶金过程的问题。在这方面做出贡献的学者有焦姆肯(M. E. Temkin)、叶新(O. A. Esin)、萨马林(A. M. Samarin)、理查森(F. D. Richardson)、弗鲁德(H. Flood)、格约瑟姆(K. Grijotheim)、卡热乌若夫(V. A. Kozheurov)和马森(C. R. Masson)等。应该指出,作为炉渣离子理论的创始人之一的萨马林在1964年出版的《炼钢生产》(手册)(Сталеплавленное производство том I)(Справочник)卷I第67页对完全离子理论所做的补充中早已指出:“在熔化晶体和进一步过热溶液中,离子键会部分地转变成饱和共价键,这会促进孤立原子团或分子的生成。”从这里可以看出,一个严肃的科学家是会根据实际情况部分地修改自己的学术观点的。由于用第二种理论不能解决平衡常数不守常和熔渣导电差异性等问题,前苏联学者丘依考(Н. М. Чуйко)进而提出了考虑未分解化合物的炉渣离子理论,成功地应用于渣钢间锰和磷的分配及炉渣氧化能力的计算。但考虑到该理论尚有采用等渗系数、使用平衡常数不当和对模型缺乏论证等不完善的地方,作者进而又用结晶化学的事实,炉渣导电的差异性,MeO-SiO<sub>2</sub>渣系的分层现象,二元渣相图中具有固液相同成分熔点的化合物的存在,晶格能和熔化能的巨大差别,CaSiO<sub>3</sub>-CaF<sub>2</sub>渣系中黏度与CaSiO<sub>3</sub>和Ca<sup>2+</sup>+2F<sup>-</sup>摩尔分数的正比关系,硅酸盐、铝酸盐、磷酸盐等介电物质的存在及炉渣热力学参数和活度与其结构的一致性等方面的事实,对前苏联丘依考教授提出的考虑未分解化合物的炉渣离子理论进行了论证,并将其重新命名为炉渣结构的(分子和离子)共存理论。到1997年,作者与课题组集体用共存理论不仅解决了二元、三元渣系各结构单元的作用浓度的计算问题,而且已应用于多元(六元至八元)渣系的化学热法、低碱度渣的造渣制度制定、渣钢间锰的分配、炉渣氧化能力、脱硫能力和脱磷能力的计算、泡沫渣和埋弧渣的造渣制度研究等,取得与实际符合的结果。由于单纯从炉渣的角度

研究冶金问题还会有片面性,作者又提出了金属熔体的原子和分子(或化学短程有序原子团)的共存理论,并按含化合物、含包晶体、含饱和相、含固溶体、含偏晶体、含共晶体和含连续固溶体的熔体等七类对金属熔体的作用浓度计算模型进行了讨论,进而开始将这种理论推广于多元金属熔体。应该指出,这方面做出重大贡献的还有持缔合模型观点的多莱扎勒克(F. Dolezalek)、蒲里高京(I. Prigogine)、许尔曼(E. Schürmann)、扎伊采夫(A. I. Zaitsev)、向井楠宏与和才京子等学者。他们的贡献在于承认溶液中有短程有序原子团或分子;但他们的共同缺点是:(1)仍然采用活度系数,其结果必然会造成与质量作用定律的矛盾;(2)在多数情况下,只选择极少数化合物(1~2个)制定模型,因此,很难保证模型反映溶液的真实结构。

为了更全面地了解冶金熔体,针对能够收集到的可靠实验数据,作者又用正负离子未分开的模型初步探讨了熔盐、熔硫和氧化物固溶体的作用浓度计算模型。

为了对以上研究工作进行总结,本书作者在国家科学技术学术著作出版基金委员会的大力资助下于1998年出版了《冶金熔体的计算热力学》。

然而七年过去了,在这期间国内外冶金熔体和溶液的热力学性质研究方面迅猛发展。受这些成绩的鼓舞,本书作者在本领域进行了持续不断的深入研究,取得了许多创新性的研究成果,并已经扩展到水溶液和有机溶液,使该方面研究体系更加深入和系统。其研究内容已经远远超出了《冶金熔体的计算热力学》一书所涉及的范围。这七年来的主要研究进展有:

(1)发现了更多证明炉渣熔体中分子和离子共存及金属熔体中原子和分子共存的事实,同时找到了二元合金、炉渣的结构单元在全成分范围内连续变化的事实,从而对炉渣和金属熔体两种共存理论做出更为详实的论证,使对两种理论的假设更符合实际和全面。

(2)发现磷在含磷二元金属熔体中不会形成饱和相,从而对含饱和相金属熔体的认识更为清晰明确。因此,对原有内容进行了重新计算和编写。

(3)研究证明不仅包晶体存在于液体金属中,而且含化合物金属熔体中的包晶体对该熔体的热力学性质还有着不可忽视的影响,从而加深了我们对包晶体的作用的认识,对这部分内容也进行了重新论述。

(4)对二元含偏晶体金属熔体的热力学性质进行了系统的研究,发现它们的活度与二元含共晶体金属熔体一样都需要用两相模型计算其作用浓度。只是前者宏观上已经分成两层溶液,而后者还机械地混合在一起。由此,使二元金属熔体的分类更为严格和全面:即由原来的六类改为现在的含化合物、含包晶体、含饱和相、含固溶体、含偏晶体、含共晶体和形成一系列连续固溶体的金属熔体七类,有关这方面的内容已经进行了改写。

(5)将质量作用定律和金属熔体的共存理论与缔合溶液模型中的合理部分相结合,并舍弃其经验参数后,系统地制定出均相和两相金属熔体的混合热力学参数( $\Delta G^m$ 、 $\Delta G^{XS}$ 、 $\Delta H^m$ 、 $\Delta S^m$ 和 $\Delta S^{XS}$ )计算公式,而且取得满意的效果。金属熔体混合热力学参数计算公式的制定就使金属熔体的热力学模型获得了两个实践检验标准(活度和混合热力学参数)及一个理论检验标准(质量作用定律),从而可以有力地保证金属熔体的共存

理论更严格和真实地反映金属熔体的结构实际和混合热力学特性。本书中增加了这部分全新的内容。

(6) 一般情况下,对绝大部分二元金属熔体,参照相图确定其结构单元已无多大问题。但对少数二元金属熔体中均相和两相两类溶液共存的情况而言,根据相图直接确定结构单元还有一定困难,如 Fe-Ti、Hg-Tl、Mg-Sn、Mg-Si、Au-Bi、K-Na、Cd-In、Ag-Sn 等二元金属熔体就是这样。经研究提出不同类型溶液间的兼并规律后,可以使这类问题迎刃而解。同理,当三元熔体中不同类型的溶液共存时,其结构单元也需要借助兼并规律来确定。这类问题对二元系金属熔体而言,虽为少数,但对三元以上的多元金属熔体来说却是频繁出现的普遍现象,已发表的不少论文可作例证。因此,提出兼并规律的重要意义在于它为推广共存理论于多元金属熔体奠定了理论基础,这些新发现当然应该及时与读者见面。

(7) 在渣与铁水间锰的分配、多元熔渣的氧化能力和脱硫能力方面有一些新研究结果发表,使这些内容更加完善。

(8) 在水溶液热力学性质研究方面已积累了不少研究结果,亟待总结,我课题组郭汉杰先生虽在有限的时间内承担这个任务,但已取得突破,这部分内容很自然地归入本书。

(9) 在有机溶液热力学性质的探索研究方面也取得了突破和有益的结果,将这部分新内容写入书中,虽然代表有机溶液有其自身的特点,但也说明它们与冶金熔体有相当多的共性。

(10) 通过用均相和两相模型把质量作用定律应用于二元金属熔体、熔渣、熔盐、熔钨、水溶液和有机溶液以研究它们的热力学性质后,发现不仅预测与实际极为符合,而且严格地遵守质量作用定律,从而证明质量作用定律对上述六类溶液是普遍适用的。这样,在世界上首先用质量作用定律统一溶液理论这个巨大工程的不是别人,正是现代的中国人,他们数十年如一日以顽强的毅力初步完成了这个复杂而又艰巨的工程。

(11) 用共存理论反思和剖析冶金熔体的一些问题后,如固态下存在的化合物,液态下能否存在;冶金熔体中生成的化合物是液态的还是固态的等,发现以前对这些问题的认识是值得进一步商榷和研究的。将这部分新内容写入书中对启发人们的创造性思维非常重要。

最后为了方便同行和读者使用,又对计算方法和程序专门写了一章。

以上新进展的内容以约 40 篇论文的形式发表于下列国内外重要刊物:(1)“CAL-PHAD”;(2)“Transaction of Nonferrous Metals Society of China”;(3)“Journal of Iron and Steel Research International”;(4)“Acta Metallurgica Sinica(English Letters)”;(5)“Journal of University of Science and Technology Beijing”;(6)“Rare Metals”;(7)《中国稀土学报》(冶金过程物理化学专集);(8)《北京科技大学学报》等。

本书内容来源于著者和课题组集体 47 年来所发表的 100 篇学术论文,其中 25 篇为 SCI 所收录;31 篇为 EI 所收录;1 篇为 ISTP 所收录。

理论来源于实践,同时其预测结果还要经过实践的检验以判断其正确与否。活度是冶金熔体理论研究的实践基础和出发点,又是其预测结果的检验标准,因此,对国内

外研究冶金熔体活度方面的著名学者启普曼、理查森、特克道根(E. T. Turkdogan)、弗鲁汉(R. J. Fruehan)、麦克林(A. Mclean)、萨马林、万谷志郎以及我国的邹元曦院士、魏寿昆院士等,我们表示由衷的崇敬。

在冶金熔体的热力学性质与相图的关系、热力学参数、混合热力学参数的计算等方面,邵象华院士曾给予我们多次精心地指导和督促,在此表示诚挚的谢意和敬意。

同时,向本书所引用文献的作者表示衷心的感谢,没有他们付出的辛勤劳动和宝贵研究成果,要写成本书是不可能的。此外,也要向我的老伴刘恕慧表示由衷的谢意和哀思,没有她无微不至的关心和创造的温暖与和睦的家庭环境,要完成此项工作也是困难的。

最后,感谢国家科学技术学术著作出版基金资助本书出版,感谢千勇院士、李正邦院士、张国成院士、李以圭教授为申请出版基金热情地撰写了推荐材料,这四份推荐材料在申报“十一五”国家重点图书方面也起了极为重要的作用。

虽然著者以极大的热情和精力编写此书,但由于自身水平所限,不足和纰漏之处仍然不可避免,所以我们诚恳地欢迎学术界的前辈和同行们提出批评和指正,以便更臻完善。

张 鉴

2007年1月



## 本书著者及写作分工

张 鉴

前言

- 第一部分 第1章 1.1  
 1.2 1.2.1,1.2.3,1.2.4,1.2.7,1.2.8,1.2.9,1.2.10,1.2.11,  
 1.2.13,1.2.15,1.2.16, 1.2.17,1.2.19  
 1.3  
 1.4 1.4.2  
 1.5,1.6,1.7,1.8,1.9,1.10  
 第2章 2.1 2.1.1,2.1.3,2.1.4,2.1.6  
 2.2 2.2.1,2.2.2  
 2.3 2.3.1 2.3.1.1,2.3.1.2,2.3.1.3,2.3.1.4,2.3.1.6,  
 2.3.1.7,2.3.1.8,2.3.1.9,2.3.1.10,2.3.2  
 第二部分 第3章 3.1 3.2.1,3.2.3,3.2.4,3.2.5,3.2.8  
 3.4  
 第4章 4.1,4.5,4.6,4.7  
 第5章,第6章,第7章  
 第三部分 第10章,第11章  
 第四部分 第13章  
 第五部分 第14章,第15章,第16章,第17章

成国光

- 第一部分 第1章 1.2.2,1.2.5,1.2.6,1.2.12,1.2.14,1.2.18,1.4.1,1.4.3,1.4.4  
 第2章 2.1.2,2.3.1.5  
 第二部分 第3章 3.2.2,3.2.6,3.2.7  
 3.3  
 第4章 4.2,4.3,4.4  
 第9章

王力军

- 第二部分 第8章

朱 荣

- 第一部分 第2章 2.1.4,2.1.5,2.2.3,2.3.3  
 第五部分 第18章

郭汉杰

- 第四部分 第12章

## 本书所采用的符号

$\Delta H^\ominus$ ——标准生成摩尔焓(简称标准生成焓);

$\Delta G^\ominus$ ——标准吉布斯生成自由能(简称标准生成自由能);

$\Delta S^\ominus$ ——标准摩尔熵(简称标准熵);

$\Delta H^m$ ——混合摩尔焓(简称混合焓);

$\Delta G^m$ ——混合摩尔自由能(简称混合自由能);

$\Delta S^m$ ——混合摩尔熵(简称混合熵);

$\Delta G^{XS}$ ——过剩吉布斯摩尔自由能(简称过剩自由能);

$\Delta S^{XS}$ ——过剩摩尔熵(简称过剩熵);

$K$ ——平衡常数;

$L_i$ ——纯物质向饱和标准态的转换系数,或一种标准态向另一种标准态的转换系数;

$a_i$ ——熔体中某组元的实测活度;

$a$ ——对炉渣而言,代表根据化学分析计算的反应前某酸性氧化物的总摩尔数或总摩尔分数;对金属熔体而言,代表某非金属或金属性较弱元素的总摩尔数或总摩尔分数;

$b$ ——对炉渣而言,代表根据化学分析计算的反应前碱性氧化物的总摩尔数或总摩尔分数;对金属熔体而言,代表金属性较强的某元素的总摩尔数或总摩尔分数;

$c$ ——代表反应前中性氧化物或性能介于金属和非金属之间的某元素的总摩尔数或总摩尔分数;

(当多元金属熔体中各组元金属性强弱不易分清时,也可令  $a$ 、 $b$ 、 $c$ 、 $d$  等按先后分别代表反应前各组元总摩尔数或总摩尔分数。)

$n_i$ ——反应平衡后某物质的摩尔数;

$\sum n_i$ ——根据化学分析计算的反应前某简单熔渣组元的总摩尔数;

$\sum n$ ——熔渣的平衡总摩尔数;

$x_i$ ——反应平衡后某碱性氧化物或强金属性元素的摩尔分数;

$y_j$ ——反应平衡后某酸性氧化物或弱金属性元素的摩尔分数;

$z_k, u_k$ ——反应平衡后熔渣、金属熔体、熔盐或熔铈等中某复杂化合物的摩尔分数;

$\sum x_i$ ——根据化学分析计算的熔体中某物质的总摩尔分数;

$\sum x$ ——冶金熔体的平衡总摩尔分数;

$N_i$ ——冶金熔体中某物质的作用浓度(服从质量作用定律的浓度),即平衡归一摩尔分数:  $N_i = x_i / \sum x = n_i / \sum n$ 。

# 目 录

## 第一部分 金属熔体

第 1 章 二元金属熔体 .....	3
1.1 含化合物金属熔体的共存理论 .....	3
1.2 含化合物金属熔体 .....	7
1.2.1 Ba-Al 熔体 .....	7
1.2.2 Bi-In 熔体 .....	8
1.2.3 Bi-Te 熔体 .....	12
1.2.4 Bi-Tl 熔体 .....	13
1.2.5 Ca-Al 熔体 .....	15
1.2.6 Ca-Si 熔体 .....	17
1.2.7 Cd-Sb 熔体 .....	19
1.2.8 Co-Ge 熔体 .....	20
1.2.9 Cr-P 熔体 .....	22
1.2.10 Cu-Mg 熔体 .....	24
1.2.11 Cu-Si 熔体 .....	25
1.2.12 Fe-Al 熔体 .....	26
1.2.13 Fe-Ge 熔体 .....	29
1.2.14 Fe-P 熔体 .....	32
1.2.15 Fe-Si 熔体 .....	35
1.2.16 Mg-Al 熔体 .....	38
1.2.17 Mn-P 熔体 .....	40
1.2.18 Mn-Si 熔体 .....	42
1.2.19 Sr-Al 熔体 .....	45
1.3 含包晶体金属熔体 .....	47
1.3.1 仅含包晶体的金属熔体 .....	47
1.3.2 既含化合物又含包晶体的金属熔体 .....	52
1.4 含饱和相金属熔体 .....	57
1.4.1 Fe-C 熔体 .....	58
1.4.2 Mn-C 熔体 .....	61
1.4.3 Fe-N 熔体 .....	65

1.4.4 Fe-S 熔体 .....	69
1.5 含固溶体金属熔体 .....	72
1.5.1 活度显对称性正负偏差的熔体 .....	72
1.5.2 活度显非对称性正负偏差的熔体 .....	77
1.5.3 结论 .....	84
1.6 含偏晶体金属熔体 .....	84
1.6.1 Cu-Pb 熔体 .....	85
1.6.2 Al-In、Cu-Tl 和 Zn-Bi 熔体 .....	87
1.6.3 Al-Zn 熔体 .....	88
1.6.4 Ga-Cd 熔体 .....	90
1.6.5 结论 .....	91
1.7 含共晶体金属熔体 .....	92
1.7.1 计算模型 .....	92
1.7.2 计算结果与讨论 .....	95
1.7.3 结论 .....	98
1.8 二元金属熔体的混合热力学参数 .....	98
1.8.1 均相金属熔体 .....	98
1.8.2 两相金属熔体 .....	111
1.9 二元金属熔体热力学性质按相图的分类 .....	118
1.9.1 含化合物金属熔体 .....	118
1.9.2 含包晶体金属熔体 .....	120
1.9.3 含饱和相金属熔体 .....	122
1.9.4 含固溶体金属熔体 .....	124
1.9.5 含偏晶体金属熔体 .....	126
1.9.6 含共晶体金属熔体 .....	128
1.9.7 形成一系列连续固溶体的金属熔体 .....	130
1.9.8 结论 .....	130
1.10 二元金属熔体中两类溶液间的兼并规律 .....	131
1.10.1 含化合物的均相溶液与含共晶体的两相溶液共存 .....	132
1.10.2 含包晶体的均相溶液与含共晶体的两相溶液共存 .....	137
1.10.3 结论 .....	141
参考文献 .....	141
<b>第 2 章 三元(含四元)金属熔体 .....</b>	<b>149</b>
2.1 均相熔体 .....	149
2.1.1 Ag-In-Sn 熔体 .....	149
2.1.2 Ca-Al-Si 熔体 .....	155
2.1.3 Fe-Cr-P 熔体 .....	156
2.1.4 Fe-Mn-P 熔体 .....	161

2.1.5 Fe-Si-P 熔体 .....	163
2.1.6 In-Sb-Cu 熔体 .....	165
2.2 含饱和相熔体 .....	169
2.2.1 Fe-Si-C 熔体 .....	169
2.2.2 Fe-Cr-C 熔体 .....	174
2.2.3 Fe-C-P 熔体 .....	180
2.3 非均相熔体 .....	184
2.3.1 有兼并关系的熔体 .....	184
2.3.2 单一共晶体熔体 .....	223
2.3.3 Fe-C-O 熔体 .....	228
参考文献 .....	233

## 第二部分 炉渣熔体

第3章 关于炉渣结构的共存理论及二元炉渣熔体 .....	241
3.1 关于炉渣结构的共存理论 .....	241
3.2 二元含化合物炉渣熔体 .....	245
3.2.1 CaO-SiO <sub>2</sub> 熔体 .....	245
3.2.2 MgO-SiO <sub>2</sub> 熔体 .....	252
3.2.3 MnO-SiO <sub>2</sub> 熔体 .....	253
3.2.4 Na <sub>2</sub> O-SiO <sub>2</sub> 熔体 .....	258
3.2.5 CaO-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 熔体 .....	262
3.2.6 MnO-TiO <sub>2</sub> 熔体 .....	265
3.2.7 CaO-B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 熔渣 .....	266
3.2.8 PbO-SiO <sub>2</sub> 熔体 .....	268
3.3 关于炉渣熔体中的饱和相 .....	272
3.3.1 CaO-SiO <sub>2</sub> 渣系 .....	272
3.3.2 MnO-SiO <sub>2</sub> 渣系 .....	274
3.3.3 MgO-SiO <sub>2</sub> 渣系 .....	276
3.3.4 FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> 熔体 .....	277
3.4 二元氧化物固溶体 .....	278
3.4.1 二元碱性氧化物系 .....	278
3.4.2 二元三氧化二物或尖晶石系 .....	282
3.4.3 结论 .....	285
参考文献 .....	285
第4章 三元炉渣熔体 .....	289
4.1 FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> 熔体 .....	289
4.1.1 结构单元和计算模型 .....	289

4.1.2 计算结果 .....	292
4.1.3 结论 .....	292
4.2 FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -TiO <sub>2</sub> 熔体 .....	293
4.2.1 结构单元和计算模型 .....	293
4.2.2 计算与实测结果的比较 .....	294
4.3 FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 熔体 .....	295
4.3.1 结构单元的确定和计算模型的建立 .....	296
4.3.2 计算结果 .....	297
4.4 CaO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 熔体 .....	297
4.4.1 结构单元及计算模型 .....	298
4.4.2 计算结果 .....	299
4.5 CaO-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> 熔体 .....	299
4.5.1 计算模型 .....	299
4.5.2 计算结果与讨论 .....	303
4.5.3 结论 .....	305
4.6 CaO-FeO-SiO <sub>2</sub> 熔体 .....	307
4.6.1 结构单元和计算模型 .....	308
4.6.2 计算结果与讨论 .....	310
4.6.3 结论 .....	313
4.7 FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 熔体 .....	313
参考文献 .....	316
<b>第 5 章 多元熔渣的氧化能力 .....</b>	<b>318</b>
5.1 含碱性氧化物 FeO 和 MnO 的熔渣氧化能力 .....	318
5.1.1 MnO-FeO-SiO <sub>2</sub> 熔渣 .....	318
5.1.2 MnO-FeO-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 熔渣 .....	319
5.1.3 MnO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> 熔渣 .....	320
5.2 除含 MnO 和 FeO 外还含有 CaO 和 MgO 等的熔渣氧化能力 .....	322
5.2.1 CaO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> 熔渣 .....	322
5.2.2 CaO-MgO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> -S 熔渣 .....	325
5.2.3 CaO-MgO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> 熔渣 .....	329
5.2.4 CaO-MgO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> -SiO <sub>2</sub> 熔渣 .....	331
5.2.5 CaO-MgO-MnO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> -SiO <sub>2</sub> 熔渣 .....	333
5.2.6 CaO-MgO-MnO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> -SiO <sub>2</sub> 熔渣 .....	334
5.3 结论 .....	336
参考文献 .....	336
<b>第 6 章 渣钢间锰的分配平衡 .....</b>	<b>338</b>
6.1 FeO-MnO 熔渣与铁水间锰的平衡 .....	338

6.2	MnO-FeO-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 熔渣与铁水间锰的分配	339
6.3	MnO-FeO-SiO <sub>2</sub> 熔渣与铁水间锰的分配	341
6.4	MgO-MnO-FeO-SiO <sub>2</sub> 熔渣与铁水间锰的分配	344
6.5	结论	347
	参考文献	348
<b>第7章</b>	<b>多元熔渣的脱硫能力</b>	<b>350</b>
7.1	MgO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 熔渣与铁水间硫的分配	350
7.1.1	计算模型	350
7.1.2	计算结果	351
7.2	CaO-MgO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> 熔渣与铁水间硫的分配	352
7.2.1	计算模型	352
7.2.2	计算结果	355
7.3	CaO-MgO-MnO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> -SiO <sub>2</sub> 熔渣与铁水间硫的分配	356
7.3.1	计算模型	356
7.3.2	计算结果	358
7.4	CaO-MgO-MnO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> -SiO <sub>2</sub> 熔渣与铁水间硫的分配	358
7.4.1	计算模型	358
7.4.2	计算结果	361
7.5	结论	362
	参考文献	362
<b>第8章</b>	<b>多元熔渣的脱磷能力</b>	<b>364</b>
8.1	如何用共存理论处理脱磷问题	364
8.2	FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> 渣系	364
8.2.1	结构单元	364
8.2.2	模型的建立	366
8.2.3	计算结果	367
8.2.4	讨论	367
8.2.5	结论	368
8.3	MgO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> 渣系	368
8.3.1	结构单元	368
8.3.2	计算模型	369
8.3.3	平衡常数 $K_3$ 和 $K_7$ 的确定	369
8.3.4	磷分配比公式的推导	370
8.3.5	计算结果	371
8.3.6	结论	371
8.4	CaO-MgO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> 渣系	372
8.4.1	结构单元	372

8.4.2 计算模型 .....	373
8.4.3 计算结果 .....	374
8.4.4 结论 .....	375
8.5 CaO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> 渣系 .....	376
8.5.1 计算模型 .....	377
8.5.2 计算结果 .....	378
8.5.3 结论 .....	378
8.6 CaO-MgO-FeO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> -SiO <sub>2</sub> 渣系 .....	379
8.6.1 计算模型 .....	379
8.6.2 计算结果 .....	381
8.6.3 结论 .....	382
8.7 CaO-MgO-FeO-MnO-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> -SiO <sub>2</sub> 渣系 .....	382
8.7.1 计算模型 .....	382
8.7.2 计算结果 .....	384
8.7.3 结论 .....	385
8.8 本章结论 .....	385
参考文献 .....	387
<b>第 9 章 炉外精炼过程中钢液脱氧的最佳炉渣碱度</b> .....	<b>390</b>
9.1 CaO-MgO-FeO-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> 精炼渣系氧化能力的计算模型 .....	390
9.2 计算结果及讨论 .....	392
参考文献 .....	394

### 第三部分 熔盐和熔铈

<b>第 10 章 熔盐作用浓度计算模型的初探</b> .....	<b>399</b>
10.1 关于正负离子未分开的模型 .....	399
10.2 二元系熔盐 .....	402
10.2.1 二元均相熔盐 .....	402
10.2.2 二元两相熔盐 .....	408
10.2.3 二元均相熔盐的混合热力学参数 .....	412
10.3 三元系 CaCl <sub>2</sub> -MgCl <sub>2</sub> -NaCl 熔盐 .....	413
10.4 结论 .....	415
参考文献 .....	415
<b>第 11 章 熔铈作用浓度计算模型的初探</b> .....	<b>417</b>
11.1 含共晶体二元熔铈 .....	417
11.1.1 活度显对称性正负偏差的熔铈计算模型 .....	417
11.1.2 活度显非对称性正偏差的熔铈计算模型 .....	418



11.1.3 计算结果和讨论	419
11.2 含复杂化合物二元熔盐	420
11.2.1 计算模型	420
11.2.2 计算结果和讨论	422
11.3 含共晶体三元熔盐	422
11.3.1 计算模型	422
11.3.2 计算结果和讨论	423
11.4 结论	424
参考文献	424

## 第四部分 水溶液和有机溶液

第 12 章 水溶液作用浓度计算模型的初探	429
12.1 水溶液的理论基础	429
12.1.1 基本概念	429
12.1.2 水溶液中存在的一些基本现象	430
12.1.3 不同浓度单位的活度与活度系数之间的换算	432
12.2 KCl-H <sub>2</sub> O 水溶液	434
12.2.1 结构单元和计算模型	434
12.2.2 计算结果及讨论	435
12.2.3 结论	436
12.3 CsCl-H <sub>2</sub> O 水溶液	436
12.3.1 结构单元和计算模型	436
12.3.2 计算结果	437
12.3.3 结论	438
12.4 NaCl-H <sub>2</sub> O 水溶液	438
12.4.1 结构单元和计算模型	438
12.4.2 计算结果	439
12.4.3 结论	440
12.5 BaCl <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O 水溶液	441
12.5.1 结构单元和计算模型	441
12.5.2 计算结果	442
12.5.3 结论	443
12.6 NaBr-H <sub>2</sub> O 水溶液	444
12.6.1 结构单元和计算模型	444
12.6.2 计算结果	445
12.6.3 结论	446
12.7 LiNO <sub>3</sub> -H <sub>2</sub> O 水溶液	446
12.7.1 结构单元和计算模型	446