

Кинетика окисления кремния, растворенного в жидком железе

Емец В.И. (МЧМ-09вм)*

Донецкий национальный технический университет

Взаимодействие растворенных в металле кремния кислорода описывается уравнением:



В общем случае эту реакцию следует рассматривать как обратимую, состоящую из двух стадий: образование твердого силиката SiO_2 и его восстановление до металлического кремния.

Исследованиями различных авторов установлено, что зарождения твердых или жидких активных включений в гомогенном металле имеет высокую вероятность, что позволяет реакцию окисления кремния рассматривать как гомогенную.

Согласно уравнению (1) прямую реакцию окисления кремния можно рассматривать как гомогенную реакцию третьего порядка.

Кинетическое уравнение реакции третьего порядка в которой участвуют два реагента имеет вид:

$$\frac{dx}{d\tau} = k \cdot (C_{\text{Si}}^{\text{H}} - x) \cdot (C_{\text{O}}^{\text{H}} - x)^2, \quad (2)$$

где k - константа скорости прямой реакции окисления кремния,

$\text{м}^3/\text{кг} \cdot \text{моль} \cdot \text{с}$;

C_{Si}^{H} и C_{O}^{H} - исходные (начальные) концентрации кремния и кислорода в металле, $\text{кг} \cdot \text{моль}/\text{м}^3$;

x - параметр, характеризующий полноту протекания прямой реакции окисления кремния, $\text{кг} \cdot \text{моль}/\text{м}^3$;

τ - время протекания прямой реакции, с.

Параметр x равен нулю в начальный момент времени ($\tau=0$) и увеличивается по мере накопления продукта реакции (SiO_2).

Уравнение (2) решается методом разделения переменных:

$$\frac{dx}{(C_{\text{Si}}^{\text{H}} - x) \cdot (C_{\text{O}}^{\text{H}} - x)^2} = k \cdot d\tau \quad (3)$$

* Руководитель – д.т.н., профессор кафедры ЭМ Дымнич А.Х.

Интегрирование левой и правой частей этого выражений при начальных условиях $\tau=0$ и $x=0$ дает:

$$\ln \frac{C_{Si}^H \cdot (C_O^H - C_O)}{C_O^H \cdot (C_{Si}^H - C_{Si})} + \frac{C_{Si}^H \cdot (C_{Si}^H - C_O^H)}{C_O^H \cdot (C_O^H - C_O)} = \kappa \cdot (C_{Si}^H - C_O^H) \cdot \tau \quad (4)$$

Из выражения (4) определяется значение константы скорости прямой реакции окисления кремния:

$$\kappa = \frac{\ln \frac{C_{Si}^H \cdot (C_O^H - C_O)}{C_O^H \cdot (C_{Si}^H - C_{Si})} + \frac{C_{Si}^H \cdot (C_{Si}^H - C_O^H)}{C_O^H \cdot (C_O^H - C_O)}}{(C_{Si}^H - C_O^H) \cdot \tau} \quad (5)$$

Константа скорости прямой реакции окисления (κ) зависит от температуры и согласно уравнению Аррениуса равна:

$$\kappa = \kappa_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT}} \quad (6)$$

где κ_0 – постоянная, м³/кг- моль⁻¹·с;

T – абсолютная температура, К;

E – кажущаяся энергия активации прямой реакции окисления кремния, Дж/кг-моль.

Проводя исследования при двух температурах, можно определить значение E по формуле:

$$E = \frac{R \cdot \ln \frac{\kappa_2}{\kappa_1}}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}} \quad (7)$$

По значению кажущейся энергии активации можно оценивать режим протекания рафинированных процессов в сталеплавильной ванне, а именно: кинетический, диффузионный или смешанный.

Определив значение кажущейся энергии активации окисления кремния по выражению (6) можно определить значение κ_0 при температуре T по выражению:

$$\kappa_0 = \kappa \cdot e^{\frac{E}{RT}} \quad (8)$$

При различных температурах параметр κ_0 должен сохранять постоянное значение. Поэтому по отклонении значений κ_0 при различных температурах можно оценивать погрешность в определении константы скорости химической реакции.