



## 炼铁新技术及基础理论研究进展

张建良 刘征建 焦克新 徐润生 李克江 王振阳 王翠 王耀祖 张磊

### Progress of new technologies and fundamental theory about ironmaking

ZHANG Jian-liang, LIU Zheng-jian, JIAO Ke-xin, XU Run-sheng, LI Ke-jiang, WANG Zhen-yang, WANG Cui, WANG Yao-zu, ZHANG Lei

引用本文:

张建良, 刘征建, 焦克新, 徐润生, 李克江, 王振阳, 王翠, 王耀祖, 张磊. 炼铁新技术及基础理论研究进展[J]. 工程科学学报, 2021, 43(12): 1630–1646. doi: 10.13374/j.issn2095–9389.2021.09.24.007

ZHANG Jian-liang, LIU Zheng-jian, JIAO Ke-xin, XU Run-sheng, LI Ke-jiang, WANG Zhen-yang, WANG Cui, WANG Yao-zu, ZHANG Lei. Progress of new technologies and fundamental theory about ironmaking[J]. *Chinese Journal of Engineering*, 2021, 43(12): 1630–1646. doi: 10.13374/j.issn2095–9389.2021.09.24.007

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2021.09.24.007>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 稀土金属脱除氧杂质的新技术及驱动机制研究进展

Research progress on novel technology and mechanisms for the removal of oxygen impurities in rare-earth metals  
工程科学学报. 2018, 40(11): 1300 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2018.11.003>

#### 中国致密油藏开发理论研究进展

Research progress on tight oil exploration in China  
工程科学学报. 2019, 41(9): 1103 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2019.09.001>

#### 中国页岩气开发理论与技术研究进展

Research progress in theories and technologies of shale gas development in China  
工程科学学报. 2021, 43(10): 1397 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2020.11.10.003>

#### 脉动热管的理论研究与应用新进展

New progress in the theoretical research and application of pulsating heat pipe  
工程科学学报. 2019, 41(9): 1115 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2019.09.002>

#### 锌的生物浸出技术现状及研究进展

Technology status and research progress of zinc bioleaching  
工程科学学报. 2020, 42(6): 693 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2019.09.24.001>

#### 炼钢连铸区段3种典型工序界面技术研究进展

Research progress on three kinds of classic process interface technologies in steelmaking–continuous casting section  
工程科学学报. 2020, 42(12): 1542 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2020.05.08.001>

# 炼铁新技术及基础理论研究进展

张建良<sup>1,2)</sup>✉, 刘征建<sup>1)</sup>, 焦克新<sup>1,3)</sup>, 徐润生<sup>2)</sup>, 李克江<sup>1)</sup>, 王振阳<sup>1)</sup>, 王翠<sup>2)</sup>,  
王耀祖<sup>4)</sup>, 张磊<sup>3)</sup>

1) 北京科技大学冶金与生态工程学院, 北京 100083 2) 北京科技大学钢铁冶金新技术国家重点实验室, 北京 100083 3) 北京科技大学大安全科学研究院, 北京 100083 4) 北京科技大学人工智能研究院, 北京 100083

✉通信作者, E-mail: [jl.zhang@ustb.edu.cn](mailto:jl.zhang@ustb.edu.cn)

**摘要** 从炼铁新技术及基础理论研究方面介绍了烧结球团提质降耗新技术、焦炭在高炉内行为解析研究、高炉喷吹清洁燃料技术、高炉长寿技术、高炉炼铁数据建模技术以及冶金尘泥再处理技术。从基础研究出发, 提出了目前最具有潜力的炼铁新技术; 然后在国家碳中和战略的大背景下, 综述了目前国际上的非高炉炼铁技术研究进展, 为我国低碳炼铁发展提供依据; 最后从最新微观研究手段出发, 介绍了目前炼铁研究领域在微观尺度的研究进展, 多尺度综合调控研究高炉炼铁过程机理, 为未来低碳炼铁发展方向提供思路。

**关键词** 炼铁新技术; 低碳炼铁; 非高炉炼铁; 模拟仿真; 节能降耗

**分类号** TG142.71

## Progress of new technologies and fundamental theory about ironmaking

ZHANG Jian-liang<sup>1,2)</sup>✉, LIU Zheng-jian<sup>1)</sup>, JIAO Ke-xin<sup>1,3)</sup>, XU Run-sheng<sup>2)</sup>, LI Ke-jiang<sup>1)</sup>, WANG Zhen-yang<sup>1)</sup>,  
WANG Cui<sup>2)</sup>, WANG Yao-zu<sup>4)</sup>, ZHANG Lei<sup>3)</sup>

1) School of Metallurgical and Ecological Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

2) State Key Laboratory of Advanced Metallurgy, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

3) Research Institute of Macro-Safety Science, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

4) Institute of Artificial Intelligence, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

✉ Corresponding author, E-mail: [jl.zhang@ustb.edu.cn](mailto:jl.zhang@ustb.edu.cn)

**ABSTRACT** The Chinese government made a statement at the 75th United Nations General Assembly in 2020 to increase the country's nationally determined contributions, adopt more effective policies and measures, strive to reach the peak of carbon dioxide emissions by 2030 and achieve carbon neutrality by 2060. In recent years, with the rapid development of the iron and steel industry, the iron and steel industry has been promoted by various measures such as large-scale equipment, high-efficiency energy utilization, and reduction of pollutant emissions. Moreover, this industry has gradually made efforts to achieve low-carbon emissions. However, due to the particularity of the steel industry's process system, the steel industry is still the main battlefield in China's carbon emission reduction. The ironmaking process accounts for the largest proportion of energy consumption and emissions in the entire process of iron and steel smelting. Annual CO<sub>2</sub> emissions of the iron and steel industry account for 6.7% of total global emissions, of which the energy consumption and emissions of the ironmaking system account for the total energy consumption of the entire iron and steel process, facing the important challenge of saving energy and emission reduction. To adapt to the trend and realize the transformation and upgrading of the ironmaking industry, various processes of the ironmaking industry have made great efforts in reform and innovation in

收稿日期: 2021-09-24

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(U1260202, 41603007, 51774032, 51804025, 51974019)

recent years. This article introduces the new technology of sintering pellet quality improvement and consumption reduction from the aspects of new ironmaking technology and basic theoretical research, analysis of coke behavior in the blast furnace, blast furnace clean fuel injection technology, blast furnace longevity technology, blast furnace ironmaking data modeling technology, and metallurgical dust and mud reprocessing technology. Starting from basic research, the new ironmaking technology with the most potential is proposed. Then, under the general background of the current national carbon neutral strategy, the current international non-blast furnace ironmaking technology research progress is reviewed to provide a basis for the development of low-carbon ironmaking in China. Finally, starting from the latest micro-research methods, it introduces the current research progress in the field of ironmaking in the micro-scale, multi-scale comprehensive regulation and control of the mechanism of the blast furnace ironmaking process, and provides ideas for the future development of low-carbon ironmaking.

**KEY WORDS** new ironmaking technology; low-carbon ironmaking; non-blast furnace ironmaking; simulation; energy-saving and cost-reducing

在十四五规划的元年,“双碳”目标、环保问题、科技创新将在各行各业逐步落地并由政策付诸于实际行动。钢铁行业作为高能耗、高排放的重工业,仍然是蓝天保卫战的主战场。现如今资源紧张,环境污染日益严重,工艺技术创新进展艰难,钢铁产业发展面临着重要变革,各类问题将倒逼钢铁企业发展低碳技术。未来钢铁工业可以通过潜在的低碳等多种工艺技术来降低 $\text{CO}_2$ 排放或者解决当前发展存在的问题。在全球“脱碳”以及工艺技术创新大潮的背景下,以降低碳排放和致力工艺创新为中心的传统钢铁冶金工艺技术变革,已成为钢铁行业绿色发展的新趋势。我国实现钢铁工艺的进步,归根结底需要依靠科技进步。传统高炉炼铁工艺和非高炉炼铁工艺正在高速发展中,传统高炉炼铁从原燃料和高炉设备出发,历经还原过程,最后处理炼铁副产物,这中间环节均可进行相应的技术创新,进而实现高炉炼铁的工艺创新;非高炉炼铁工艺主要是熔融还原工艺和直接还原工艺,两种工艺都旨在减少焦炭的使用,长远计划实现“双碳”目标。需要强调的是,无论是传统高炉炼铁工艺还是非高炉炼铁工艺,其本质的还原反应是相同的,因此,其中涉及的科学问题是相同的,立足科学问题的解释和解决,可极大的为工艺生产提供思路。科学问题与工程问题的结合,将为炼铁工艺提供良好的发展方向。

## 1 烧结球团技术提质降耗技术

### 1.1 高效低耗 1000 mm 超厚料层烧结技术

在我国,长流程的钢铁生产仍然占据主导地位,2020年铁钢比仍然维持在80%以上,铁矿石烧结生产仍然主要负担着高炉含铁炉料供给<sup>[1]</sup>。烧结生产是钢铁流程中能耗最高、污染物排放量最多的工序之一<sup>[2]</sup>,因而发展厚料层烧结技术是实现

我国钢铁工业节能减排的有力措施。当前,国内外烧结机的料层厚度普遍处于700~900 mm水平,少数企业实现900 mm料层生产,但始终未能突破1000 mm超厚料层烧结的瓶颈。经分析,超厚料层烧结的限制性因素主要有两点:一是料层厚度持续升高后的高负荷对料层透气性的限制<sup>[3]</sup>;二是久高不下的漏风率对料层风量的限制。

基于此,北京科技大学炼铁新技术梯队从烧结理论层面出发,着眼于工艺全流程,以天钢联合特钢的两台230 m<sup>2</sup>烧结机为实践样本展开了1000 mm超厚料层烧结技术的研发。针对透气性,提出从新型强化制粒、抑制过湿层、促进燃料燃烧三个层面进行工艺技术与开发;针对漏风率,设计了滑道密封、栏板加固和细节治理等工艺及手段。同时,基于提出的料层热量峰、火焰峰和液相冷凝峰的“三同步”理论,确立了活性生石灰为超厚料层技术开发的核心载体<sup>[4]</sup>。最终,形成了如图1(a)所示的综合性的超厚料层烧结技术体系和针对性的全活性石灰强化烧结技术<sup>[5]</sup>。在230 m<sup>2</sup>烧结机上实现了长期高效、稳定、低耗的烧结生产。烧结机利用系数达到1.87 t·m<sup>-2</sup>·h<sup>-1</sup>,固体燃料仅为41.85 kg·t<sup>-1</sup>,烧结电耗降至27 kW·h·t<sup>-1</sup>,漏风率降至34%,各项指标均位于行业前沿。在此基础上,1000 mm的厚料层下维持了烧结矿纵向上的性能和成分的质量均衡,烧结矿微观矿物相以铁酸钙黏结相与铁氧化物晶粒的交织形式为主,烧结矿各项质量指标(如图1(b)所示)满足高炉高效冶炼需求,其中包括还原粉化指数(Reduction degradation index, RDI),RDI<sub>+6.3</sub>为还原后大于6.5 mm的物料比例,RDI<sub>+3.15</sub>为还原后大于3.15 mm的物料比例,RDI<sub>-0.5</sub>为还原后小于0.5 mm的物料比例。此外,固体燃料与电耗的降低带来实质性的CO<sub>2</sub>、NO<sub>x</sub>、SO<sub>2</sub>的减排,在碳中和背景下意义卓著。

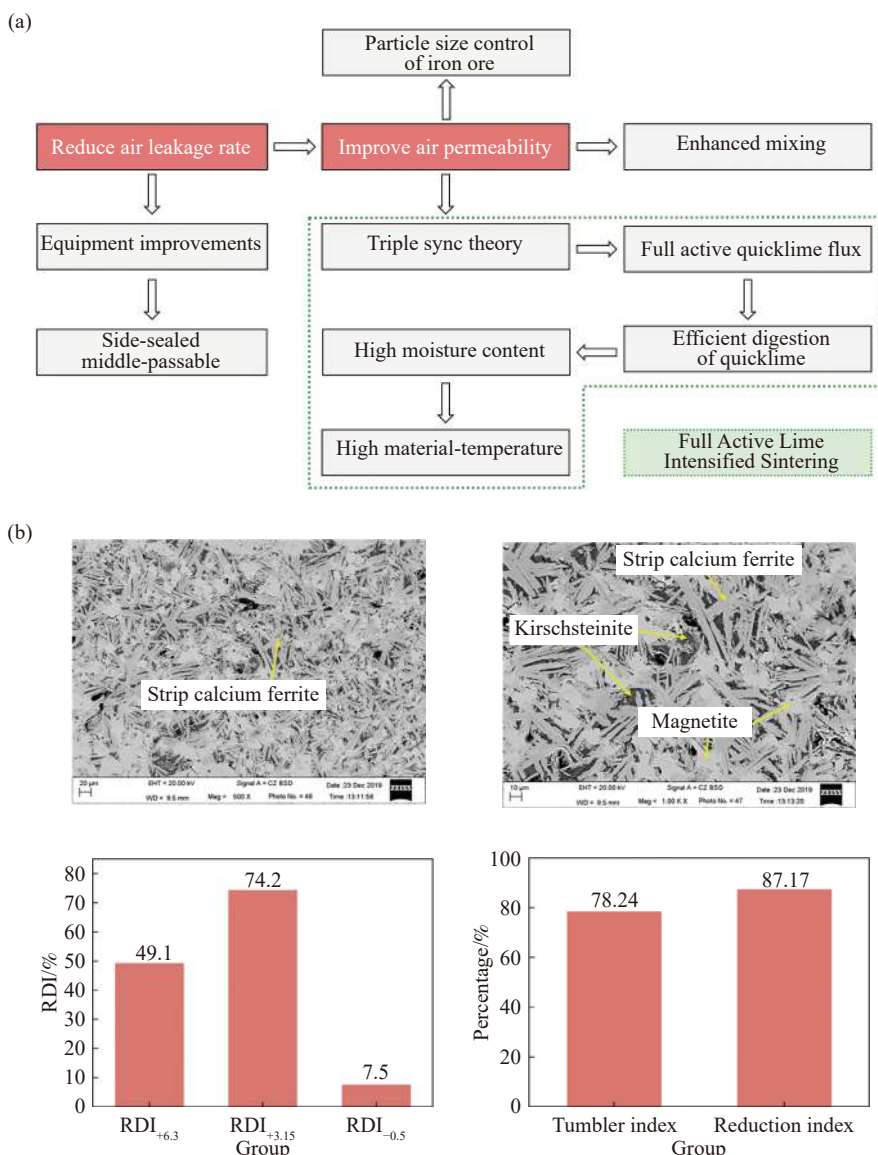


图 1 (a) 超厚料层烧结综合技术体系; (b) 1000 mm 超厚料层条件下烧结矿的成分及冶金性能

Fig.1 (a) Comprehensive technology system for ultra-thick layer sintering; (b) composition and metallurgical performance of the sinter under a 1000 mm ultra-thick layer

## 1.2 高品质功能性球团制备关键技术及脉石元素迁移评价体系

近几年随着国家钢铁行业低碳绿色发展的逐步推进,高炉炉料结构中球团比例的不断升高,镁质球团、碱性球团和含钛球团的成功应用,进一步丰富完善球团制备基础理论<sup>[6-7]</sup>,开发不同类别的高品质功能性球团,及构建脉石元素迁移评价体系成为当前炼铁原料工艺技术发展的新技术.在球团矿升温氧化焙烧过程,伴随着脉石矿物间或脉石与铁氧化物间的复杂固相反应,碱性球团内部甚至存在低熔点液相与铁氧化物相间的固-液相反应,对于 MgO、SiO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、CaO、TiO<sub>2</sub> 等脉石氧化物对球团氧化及焙烧固结的影响机制,之前的研究<sup>[8-9]</sup>多从宏观性能角度或矿物角度进行.

基于此,炼铁新技术科研团队针对镁质球团、碱性球团制备工艺进行了优化,通过解析多元矿物和熔剂条件下,球团内部“固相-液相-孔隙”的形成演变机制,构建了“固相-液相-孔隙”多相协同作用下脉石元素迁移评价体系,为高品质功能性球团的制备和应用奠定理论基础.

采用分子动力学方法首次探究了赤铁矿在高温焙烧过程连晶的形成及演化机制,从分子角度揭示了连晶生长过程原子的运动迁移特征、晶型转变、连晶长大机制<sup>[10]</sup>.为进一步解释脉石元素的运动迁移特征,应用镁质熔剂与铁矿粉制备扩散偶,将制备好的扩散偶在卧式管式炉中进行焙烧,使用 SEM 对反应后试样微观形貌进行观察,构建脉石元素迁移扩散评价体系<sup>[11]</sup>.在氧化焙烧过程

中, 氧化镁粉可以与铁矿粉发生反应, 生成镁铁尖晶石. 并且, 在添加有钙质熔剂下, 界面间产生的铁酸钙液相有助于 Mg 和 Fe 元素的扩散, 提升其迁移能力, 进而促进镁质添加剂的矿化<sup>[12]</sup>.

### 1.3 富氢烧结研究进展

烧结与高炉工序的 CO<sub>2</sub> 排放量约占工业排放总量的 60%<sup>[13]</sup>, 为大幅度减少烧结矿生产过程中 CO<sub>2</sub> 的排放量, JFE 钢铁公司开发出向烧结机喷吹氢系气体燃料的超级烧结技术“Super-Sinter”, 并成功的应用于生产<sup>[14-15]</sup>. 例如, 该技术已于 2009 年 1 月在京滨第一烧结厂投入商业运行, 并持续稳定运行至今. 结果, 烧结过程的能源效率大大提高, 而且在京滨第一烧结厂已实现二氧化碳排放量最多减少约 60000 t·a<sup>-1</sup>. 2014 年 7 月 17 日, JFE 钢铁公司宣布, 在世界上首次成功开发出在烧结矿生产过程中可根本性改善生产率的向烧结机复合喷吹氧和氢系气体的超级烧结技术, 并获得实用化. 在此次新技术的开发中, 组合了向烧结机喷吹氧的高氧富化作业和“Super-Sinter”技术, 可大幅度改善焦粉和氢系气体的燃烧性, 并通过控制燃烧位置, 可比“Super-Sinter”技术在最佳烧结温度保

持 2 倍以上的时间. 新技术在 JFE 钢铁公司的 2 台烧结机上得到应用, 大大改善了高品质烧结矿的生产率.

## 2 高炉内部焦炭多相反应行为解析

碱金属碳酸盐对焦炭气化反应均有着催化作用, 且催化效应对气化过程有一个极限, 由于焦炭中碳为非均匀乱序结构以及内生矿物的催化作用, 导致碱金属碳酸盐的催化极限较低. 动力学研究表明石墨碳和焦炭的气化反应均存在动力学补偿效应<sup>[16]</sup>. 被钾蒸气碱化后的焦炭组织受到严重破坏, 伴随着有碎屑和焦粉的产生, 这表明钾蒸气对焦炭有很强的直接破坏作用, 这种现象被称为“剥落效应”, 而钠蒸气不具有这种直接破坏作用(如图 2(a)所示). 碱化产生的新生矿物相分别为六方钾霞石或者钾铝硅酸盐(KAlSiO<sub>4</sub>)、钠铝硅酸盐(Na<sub>6</sub>Al<sub>4</sub>Si<sub>4</sub>O<sub>17</sub>)<sup>[17]</sup>, 并且钾钠均可以与碳基体产生层间化合物导致碳基体体积膨胀<sup>[18]</sup>. 含钾矿物和含钠矿物对焦炭气化反应的催化程度相近. 由于钾蒸气的直接破坏作用比钠蒸气强很多, 因此钾蒸气在高炉内对焦炭性能的破坏能力更大.

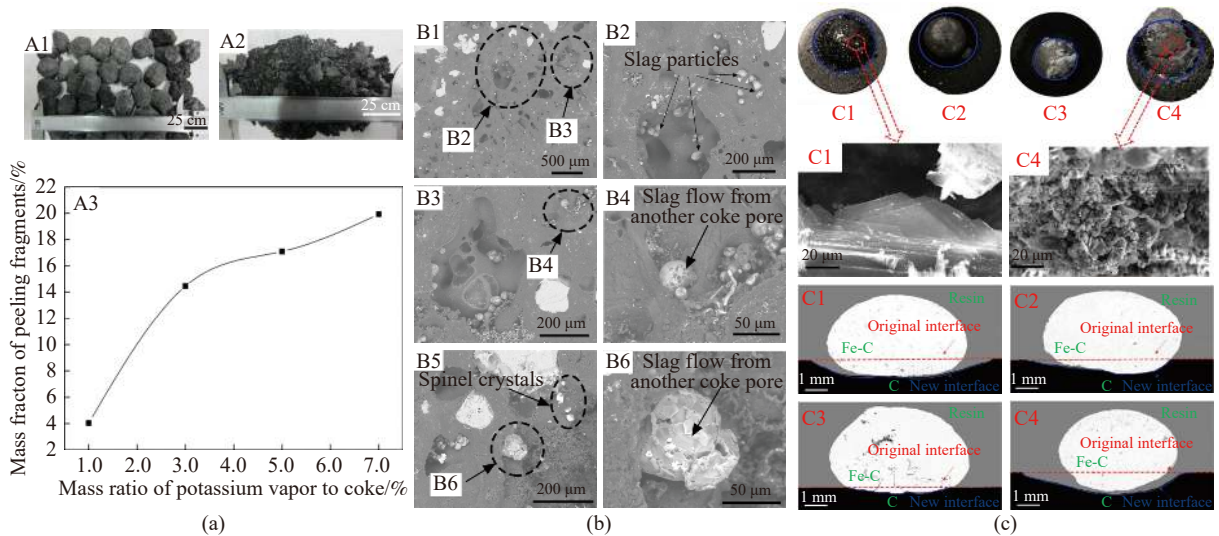


图 2 (a)碱化前(A1)后(A2)的焦炭样品及剥落的焦炭碎屑质量随着 K 含量的变化; (b)表征炉渣流过炉缸的焦炭内部气孔管道的 SEM 图; (c)不同碳质基质溶解后的形貌

Fig.2 (a) Expansion behavior of minerals in the coke before (A1) and after (A2) being potash alkalinization; (b) SEM image of the pore pipe inside the coke that characterizes the flow of slag through the hearth; (c) morphology of different carbonaceous substrates after dissolution

通过对风口焦炭和炉缸焦炭的分析, 发现焦炭内的灰分在风口位置的高温区将会熔融并迁移到焦炭表面, 熔融灰分包裹焦炭表面会阻碍焦炭与其他物相(气、固、液)的反应(如图 2 所示)<sup>[19]</sup>. 炉腹渣中的 FeO 的还原在焦-渣界面发生, 反应生成的液态先在焦炭表面形成一个铁液层. 焦-渣之间的反应将通过侵蚀反应作用对焦炭的结构和组

织产生破坏. 所有的炉缸焦炭样品, 无论尺寸大小, 均已经被严重的石墨化. 焦炭尺寸越小, 其石墨化程度越高, 这表明了焦炭在高温区的石墨化从表层开始, 且石墨化的过程伴随焦粉的产生<sup>[20]</sup>. 产生的焦粉很容易与渣铁形成复杂混合物, 这会影响到高炉高温区的透气透液性. 炉缸的多孔焦炭内部被发现充满了炉渣, 而焦炭内部原始的灰

分已经完全融入炉渣中。

借助静滴法和铁覆盖法对石墨向铁水中的溶解行为进行了分析, 碳向铁中的溶解在低温下就能够发生, 甚至在铁为固体状态下也可发生(如图 2(c) 所示)。渗碳完成后, 不同来源的碳在冷却时会以不同的形式析出。从石墨中溶解的碳会形成尺寸较小的不规则的层片状结构。而这些小的石墨晶体会与溶液中原有的 C 聚集形成尺寸较大的树枝状晶体<sup>[21]</sup>。由于 Fe-Fe 键间的排斥力更大, 铁原子向石墨中移动更加困难, 而碳原子向铁液中的移动却相对容易, 最终在铁碳间形成了 Fe-C 界面层。焦炭中气孔的存在能够增加冶金焦炭向铁水中的溶解能力, 一方面, 气孔的存在造成焦炭的不均匀溶解, 并且为液态铁液提供了充足的流动空间, 增加了铁碳的接触面积; 另一方面, 铁碳界面处不再有矿物质的积累, 界面矿物层对焦炭溶解的抑制被焦炭中的气孔减弱<sup>[22-24]</sup>。

### 3 高炉清洁高效喷吹技术

钢铁工业是我国国民经济的重要基础产业, 其主要依靠的煤炭资源分布极其不均匀, 无烟煤和优质烟煤的储量仅占 15%。国内众多钢铁企业不断扩大炼铁用煤炭资源范围, 兰炭、低阶煤、焦炉煤气和生物质的喷吹应用价值被挖掘。

兰炭是低质煤经过中低温干馏的半焦, 具有固定碳高、化学活性高、热值高、灰分低、硫低、磷低的特点<sup>[25]</sup>。研究表明, 兰炭可以用来替代优质的无烟煤资源进行高炉喷吹, 如将兰炭和烟煤混合喷吹。烟煤的燃烧性优于兰炭, 在混合燃烧过程中可以促进兰炭的燃烧。同时, 兰炭低硫低氮的特点有助于减少高炉入炉硫负荷、降低燃料比及铁水成本。国内钢铁企业积极进行高炉喷吹兰炭粉工业试验, 带来一定的经济效益和社会效益<sup>[26-27]</sup>。我国低阶煤资源储量丰富, 但目前高炉炼铁喷吹用煤主要以无烟煤和优质烟煤为主<sup>[28]</sup>。高比例低阶煤在高炉喷吹领域的应用在不断探索。实验结果表明, 低阶煤具有较高的燃烧性和反应性, 有助于提高煤粉的燃烧率。研究发现烟煤与无烟煤混合后能够有效的降低烟煤的爆炸性, 综合考虑选择合适的混煤方案, 能大大提高低阶煤在高炉喷吹中的应用价值<sup>[29-30]</sup>。

焦炉煤气作为炼焦生产的副产品, 其用于高炉喷吹在国内外已开展很多富有成效的研究<sup>[31]</sup>。焦炉煤气作为富氢燃料, 用于高炉喷吹可以提供良好的还原剂, 实现 CO<sub>2</sub> 减排, 同时提高焦炉煤气利用价值。焦炉煤气喷吹可以明显降低直接还原,

发展间接还原, 降低高炉焦比<sup>[32]</sup>。通过基础研究和工业应用的结果都可以发现, 高炉焦炉煤气等富氢燃料都可以达到节能降耗的效果, 但是对于不同高炉的使用应根据高炉的状态所决定。

天然气的主要成分是 CH<sub>4</sub>(90% 以上), 且其中的烃类气体热值高, 经转化后可得到以 H<sub>2</sub> 和 CO 为主的还原性气体<sup>[33-34]</sup>, 可供铁矿石还原焙烧<sup>[35]</sup>、高炉喷吹和铁矿石的直接还原等, 是气体燃料中最受欢迎的一种。高炉直接喷吹天然气至炉内吸热裂解成还原气, 为防止冷气入炉降温、天然气不完全燃烧等降低炉温的现象发生, 需要高富氧率和高风温等相应工艺条件。为提高炼铁高炉燃料利用率和热效率, 降低后续炼钢炉外脱硫等工序成本, 国外又开发了炉身喷吹高温还原气体工艺。该工艺是将碳氢化合物燃料先在炉外分解, 重整制成高温(1000 °C 左右)、还原性强的气体, 再从炉腰或炉身下部间接还原激烈反应区喷入高炉, 减少高温区的热支出, 可以大幅度降低高炉燃料消耗。国外炼铁高炉喷吹天然气(150 m<sup>3</sup>·t<sup>-1</sup>)高温转换的还原气体, 使焦比降到了 300 kg·t<sup>-1</sup> 以下, 高炉利用系数提高 2.4 以上。

生物质是仅次于煤炭、石油、天然气的第四大资源, 具有可再生、碳中性的环保优势。综合考虑焦炭、煤粉的成本及污染物排放, 高炉喷吹生物质具有巨大的前景<sup>[36]</sup>。由于生物质存在可磨性差、体积密度小、能量密度低等缺陷<sup>[37]</sup>, 不宜直接利用, 因此, 通常需进行转化处理。生物质经碳化后得到的生物质焦具有可磨性好, 固定碳含量较高, N、S、P 及灰分含量低, 燃烧性和反应性良好等一系列优点, 适合用作炼铁过程的发热剂和还原剂<sup>[38]</sup>。研究表明, 煤中掺入松木焦后, 混煤的活化能和指前因子均随混煤中松木焦比例的增加而降低, 将松木焦掺入煤中后, 混煤的活化能和指前因子均随松木焦的掺入比例增加而降低, 促进了煤粉的燃烧催化过程<sup>[39]</sup>。

综合考虑, 拓展高炉喷吹燃料资源范围, 缓解我国高炉喷煤对优质无烟煤资源的依赖是目前炼铁工作者的紧迫任务。钢铁企业应结合自身的地理优势, 在高炉喷吹资源拓展方面不断创新, 充分利用本地低阶煤资源、煤化工产品和生物质等资源进行冶炼, 实现高炉清洁高效喷吹。

## 4 长寿高炉新装备研发及评价

### 4.1 高炉炉缸碳复合材料研发及性能

碳复合材料将碳组分合理引入氧化物材料, 同时保留制品内部的微孔结构, 实现碳质和陶瓷

质材料的有机结合. 碳复合材料既能发挥炭砖优异的导热性能, 同时兼备陶瓷杯良好的抗铁溶蚀、抗渣及抗碱性能, 因此能够很好适应高温多元复

杂的服役环境<sup>[40-41]</sup>. 碳复合材料制备过程中内部会发生原位反应产生  $\beta$ -SiC 晶须, 如图 3 所示, 一方面能填充材料气隙, 提高材料致密度, 另一方面,

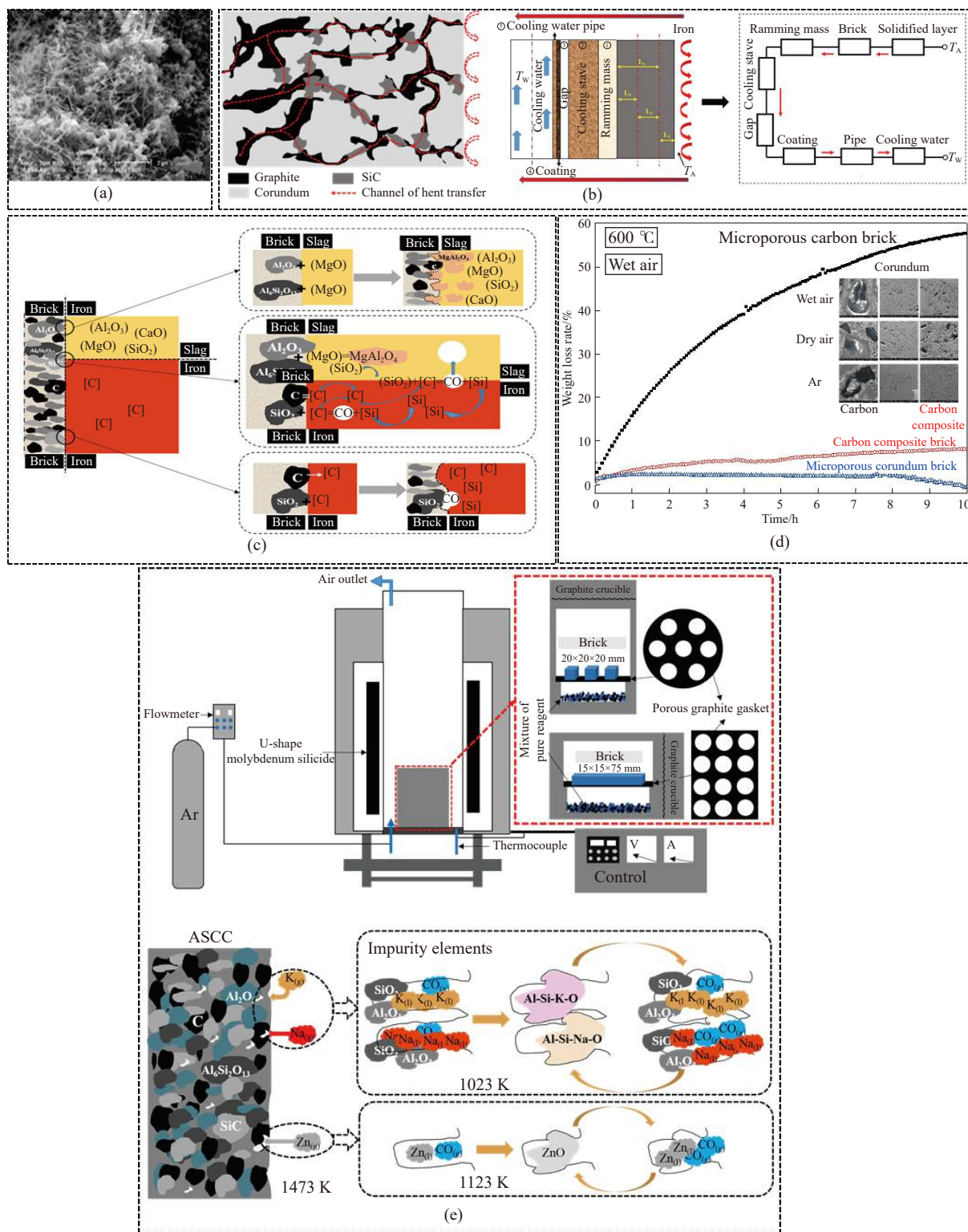


图 3 碳复合材料综合性能. (a) SiC 晶须; (b) 碳复合材料导热机制; (c) 碳复合材料渣铁侵蚀机理; (d) 不同材料氧化侵蚀对比; (e) 碳复合材料有害元素侵蚀装置及机理

Fig.3 Comprehensive properties of the carbon composite material: (a) SiC whiskers; (b) thermal conduction mechanism of carbon composites materials; (c) slag-iron erosion mechanism of alumina-carbon composite brick; (d) oxidation erosion of different materials; (e) erosion device and mechanism of harmful elements in carbon composite materials.

$\beta$ -SiC 具备较强的共价键和晶体结构, 有效降低声子散射现象, 保障材料导热性能. 目前已针对碳复合材料建立了包括抗铁水溶蚀、抗氧化性、抗有害元素侵蚀等在内的高炉用耐火材料综合评价体系.

在典型高炉渣铁侵蚀实验后发现, 与炉渣接触界面形成以镁铝尖晶石和石墨碳等高熔点物质为主的保护层, 与铁水接触面形成以刚玉相为主的氧化物层, 有效的阻隔熔融渣铁的侵蚀, 如图 3 所示, 其中  $T_A$  表示耐火材料热面温度,  $T_W$  表示冷却水温度, 与单一材质耐火材料相比, 具备良好的抗熔融渣铁侵蚀性能. 在水蒸气及  $CO_2$  等氧化性气氛侵蚀下, 碳复合材料中的 SiC 能氧化生成致密  $SiO_2$  保护膜, 从而减少氧化气氛下的损蚀. 与传统炭质材料相比, 碳复合材料能保证与炭质材料导热性能基本持平的情况下, 抗氧化性能远优于炭质材料, 如图 3 所示<sup>[42-43]</sup>. 在有害元素侵蚀情况下, 致密的碳复合材料能有效的阻碍有害元素的侵入, 同时碳复合材料良好的导热性能促进热面保护层的生成<sup>[44]</sup>. 碳复合材料导热性能受石墨碳、 $Al_2O_3$  和  $\beta$ -SiC 综合作用, 最终表现为随温度升高而降低的趋势, 符合高炉炉缸温度场温度分布要求.

#### 4.2 高炉炉体铜钢复合冷却器研发及表征

随着高炉向大型化、长寿化及高强度冶炼方向的不断发展, 对高炉高热负荷区域冷却器的安全长寿提出了更高的要求. 传统铸铁冷却壁结构强度高但导热系数低、铜冷却壁导热系数高但热强度低, 均难以适应大型高炉的长寿需求<sup>[45-46]</sup>. 高炉冷却器长寿已成为高炉长效冶炼及深化节能减排的限制性环节. 为弥补铸铁冷却壁与铜冷却壁的固有缺陷并发展其各自优势, 研发了一种新型铜钢复合冷却壁.

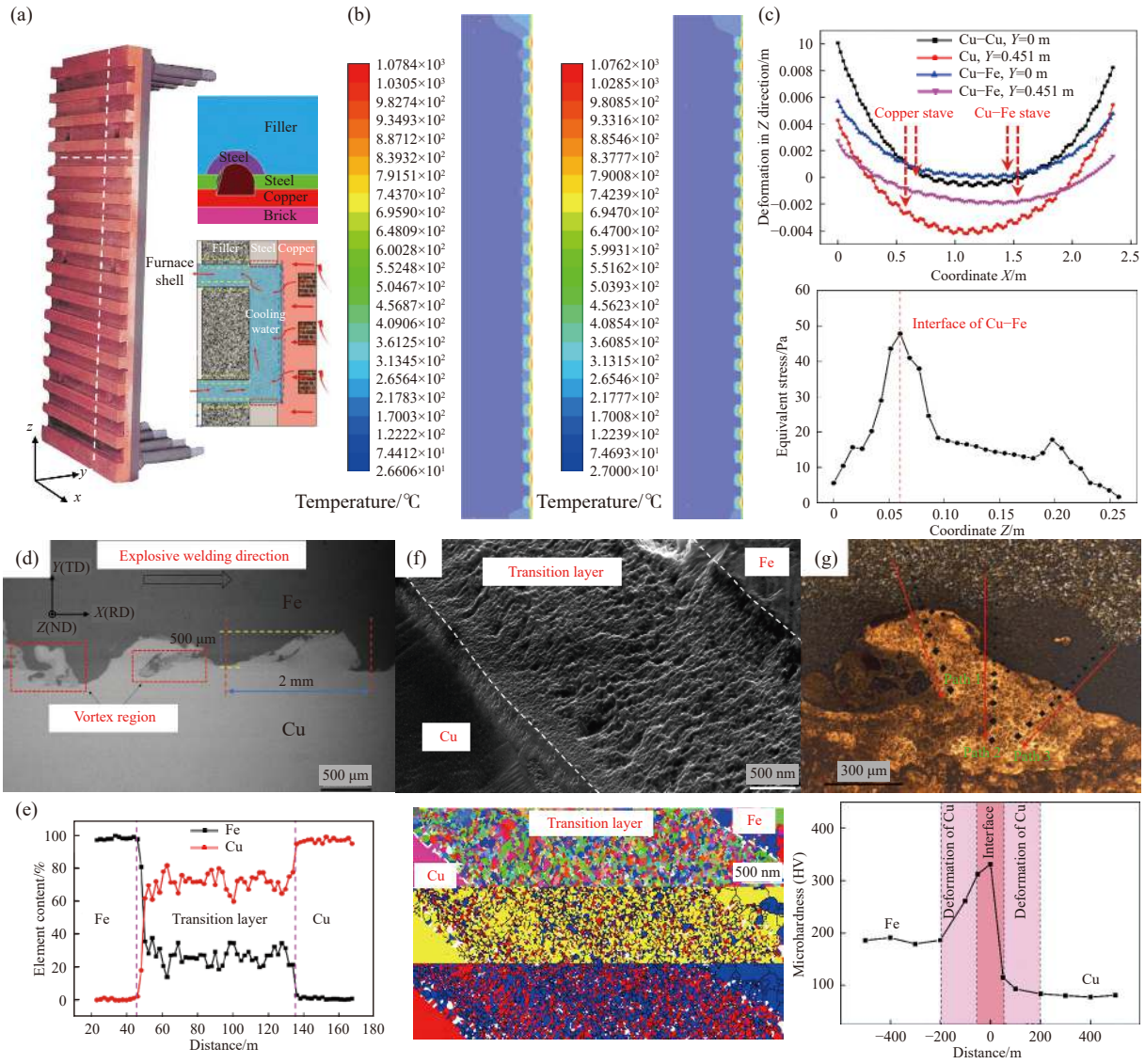
铜钢复合冷却壁主要采用爆炸焊接技术进行制备, 并在传统冷却壁的基础上在材质选择、制作工艺及结构设计上进行了优化, 如图 4(a) 所示<sup>[47]</sup>. 铜钢复合冷却壁热面采用厚度为 70 mm 的 TU2 无氧铜, 冷面采用厚度为 20 mm 的 Q345R 不锈钢板. 水通道贯穿钢板至铜板并采用焊接方式形成水通道, 冷却水直接与热面铜接触, 能够很好地保证冷却水与铜的热交换能力<sup>[48]</sup>. 如图 4(b)、(c) 所示<sup>[49]</sup>, 在 1200 °C 下铜钢复合冷却壁热面渣皮较铜冷却壁热面渣皮高出约 2.2 °C, 壁体平均温度高出约 4.4 °C, 两者导热能力相差较小, 而图 4(c) 显示在厚度为  $Y=0$  及  $Y=0.451$  m 位置, 铜钢复合冷却壁抗变形能力约为铜冷却壁的 1/2, 且界面处等效应力

在合理范围内. 铜板与钢板的结合程度决定了铜钢复合冷却壁质量的合格性, 如图 4(d) ~ (f) 所示<sup>[49]</sup>, 铜与钢的结合界面呈现典型的正弦波形状, 两者结合紧密. 在过度层位置铜原子与钢原子分布均匀, 且由于爆炸焊接作用晶粒得到细化, 约在 5 ~ 20  $\mu\text{m}$  之间. 如图 4(g) 所示, 对界面层的显微硬度测试表明, 界面层位置显微硬度高于铜和钢的显微硬度, 能够满足冷却壁在高炉上的安全正常使用.

### 5 高炉炼铁数据建模

高炉内发生的复杂物理化学反应、高温、高压、腐蚀性环境以及高炉结构的封闭性, 加大了对掌握和控制高炉内部及铁水质量的难度. 随着传感器、探测器质量的增强、冶炼数据的长期积累、机器学习算法的逐步完善及计算机计算能力的不断提高, 基于数据驱动的高炉冶炼模式正不断发展, 对于高炉冶炼参数的预测建模研究不断完善, 这促使高炉炼铁的自动化、智能化水平不断提高<sup>[50]</sup>. 例如, 采用大数据分析的手段, 基于高炉的历史生产数据, 以炉况稳定性为依据优选出部分布料矩阵, 对基于上述矩阵条件的料层分布进行图形可视化和特征参量定量化, 进一步对比分析优化高炉的布料制度<sup>[51]</sup>. 采用最近邻算法和主成分分析方法, 结合实验数据和高炉冶炼过程积累的数据, 对高炉炉渣黏度进行预测建模, 模型的预测效果如图 5 所示. 所构建的模型在测试集上的表现结果表明, 该模型可以对高炉炉渣黏度实现较好的预测<sup>[52]</sup>; 基于支持向量回归方法对高炉煤气利用率和铁水温度进行预测建模, 对铁水温度和煤气利用率的预测效果分别如图 5(a) 和 (d) 所示. 所构建的两种预测模型对高炉煤气利用率和铁水温度的预测准确率达到了较高的水准<sup>[53]</sup>(图中的 SVR 为支持向量回归); 另外, 神经网络和贝叶斯网络方法也被用于高炉铁水硅含量的预测, 结果表明, 与神经网络等其他方法相比, 贝叶斯网络更适合对高炉冶炼过程进行状态解析, 贝叶斯网络透明的推理过程更对高炉操作者判断炉温变化趋势具有指导意义<sup>[54]</sup>.

基于数据驱动的高炉冶炼参数预测模型的开发正逐渐助力传统的高炉操作由黑箱转为灰箱, 这为高炉炼铁的研究提供了区别于基于冶金机理建模和数字模拟仿真建模的另一模式. 这些方法将帮助高炉操作者及时调整高炉操作, 防止高炉发生炉冷、炉热等一系列问题, 从而提高冶炼质



**图4** 铜钢复合冷却壁制造与表征<sup>[47-49]</sup>。(a)铜钢复合冷却壁本体及水道焊接形式示意图；(b)铜冷却壁与铜钢复合冷却壁温度场分布对比；(c)铜冷却壁与铜钢复合冷却壁相同厚度位置变形量；(d)Cu-Fe 界面微观结构；(e)Cu-Fe 界面元素分布；(f)Cu-Fe 界面晶粒大小；(g)Cu-Fe 界面显微硬度

**Fig.4** Manufacture and characterization of the copper and steel composite cooling stove<sup>[47-49]</sup>. (a) schematic diagram of copper and steel composite cooling stove body and channel welding form; (b) comparison of temperature field distribution between copper cooling stove and copper-steel composite cooling stove; (c) deformation of copper cooling stove and copper-steel composite cooling stove with the same thickness; (d) Cu-Fe interface microstructure; (e) Cu-Fe interface element distribution; (f) Cu-Fe interface grain size; (g) Cu-Fe interface microhardness

量。但值得注意的是，基于数据驱动和机器学习方法所构建的部分模型，它们的构建依靠于历史冶炼数据，无法从机理层次解释模型背后的逻辑，具有不可解释性，因而对于高炉生产参作者，这种模型与机理模型相比稍欠可信度。

## 6 冶金尘泥高效处理技术

钢铁冶金尘泥是钢铁冶炼的主要固废之一，具有成分复杂、产量大、难处理等特点<sup>[55]</sup>。目前部分企业将冶金尘泥循环用于高炉炼铁，但尘泥中有害元素严重影响高炉顺行，导致钢铁企业冶金

尘泥大量堆置，严重威胁生态环境，是制约我国钢铁工业绿色发展的关键共性问题。

### 6.1 钢铁冶金尘泥高效利用基础理论

钢铁冶炼流程长的特点使得冶金尘泥来源广泛。不同工序的尘泥成分、性能差异巨大。因此研究钢铁企业尘泥的特征工艺参数，对于选择合适的高效处理技术具有重要意义。Liu等<sup>[56]</sup>充分研究了不同尘泥的有价元素含量、成型性、自还原性、熔分性及磁性富集性等特征工艺参数。Li等<sup>[57]</sup>和Wang<sup>[58]</sup>等揭示了富碳粉尘的气化反应机理。建立了冶金尘泥评价体系，为后续尘泥处理工艺

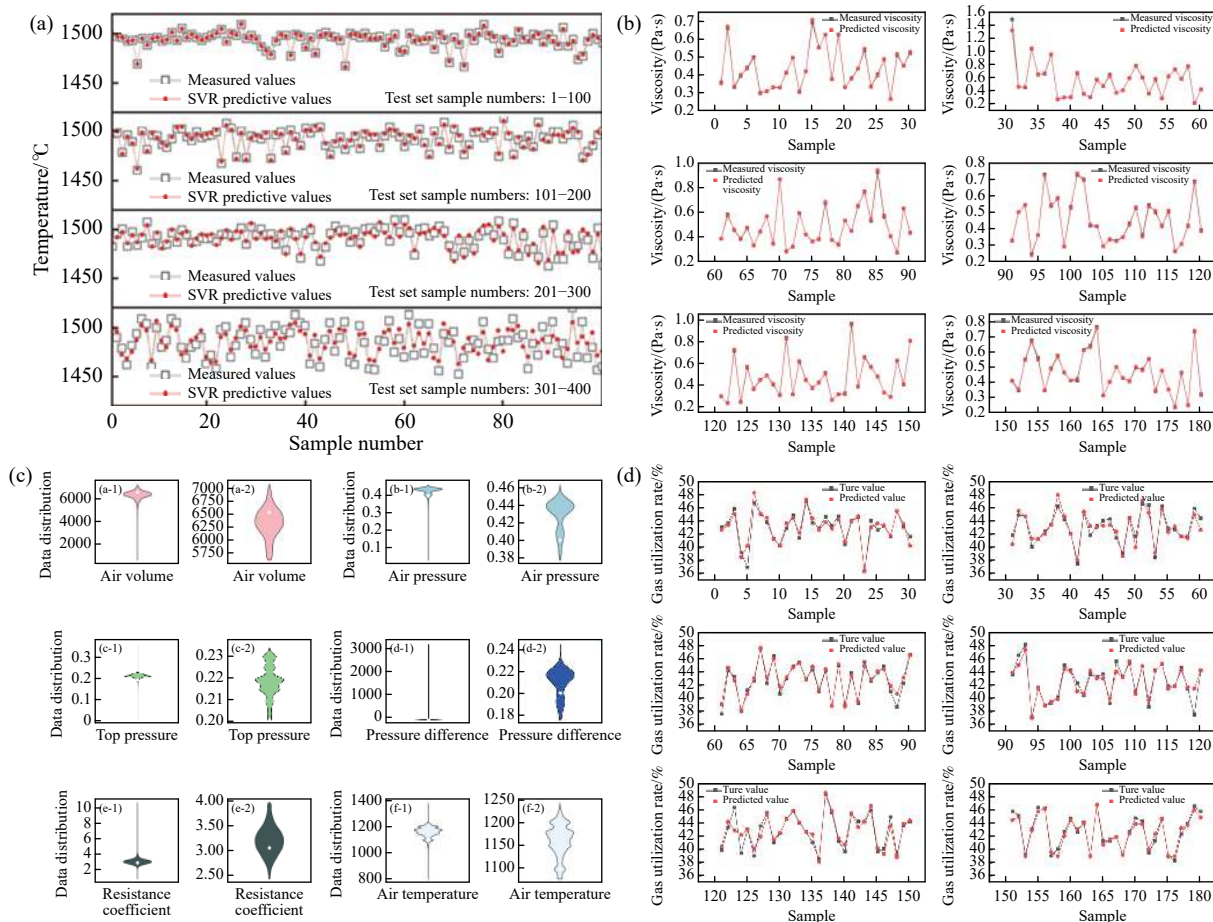


图 5 (a) 基于支持向量回归(SVR)的铁水温度预测模型在测试集上的预测结果<sup>[54]</sup>; (b) 炉渣黏度预测模型在测试集上的预测结果<sup>[52]</sup>; (c) 对煤气利用率进行预测建模时对原始数据进行数据预处理前后的数据分布对比图<sup>[53]</sup>; (d) 高炉煤气利用率预测模型在测试集上的预测结果<sup>[53]</sup>

Fig.5 (a) Prediction results of the support vector regression (SVR)-based iron temperature prediction model on the test set<sup>[54]</sup>; (b) prediction results of the slag viscosity prediction model using the test set<sup>[52]</sup>; (c) comparison of the data distribution before and after the original data preprocess during the gas utilization rate modeling<sup>[53]</sup>; (d) prediction results of the blast furnace gas utilization prediction model on the test set<sup>[53]</sup>

的开发提供技术依据。

自还原技术处理含铁尘泥是将含铁尘泥和含碳原料混合后制成自还原团块, 高温焙烧还原生产海绵铁或高温铁水。由于自还原技术能够实现含铁尘泥的资源化利用, 一直以来备受关注, Tecnored 工艺<sup>[59]</sup>、Oxycup 工艺<sup>[60]</sup>、Fastmet 工艺<sup>[61]</sup>、Itmk3 工艺<sup>[62]</sup>等均是基于自还原技术开发而来。王飞等<sup>[63]</sup>以水泥为黏结剂制备了含铁尘泥自还原团块, 研究了尘泥团块还原焙烧过程中硅酸盐-铁连晶-渣相的复合黏结机制, 揭示了锌元素在竖炉处理尘泥团块中的物质迁移规律以及挥发行为, 为尘泥团块高效脱锌提供了理论指导。

## 6.2 炼钢污泥与除尘废水无害化循环烧结技术

每生产 1 t 钢会产生 2~3 m<sup>3</sup> 的除尘废水和 15~20 kg 的转炉污泥, Wang 等<sup>[64]</sup>利用炼钢污泥与除尘废水掺混后返回铁矿烧结进行协同处理, 阐明了高温烧结过程 K、Na、Zn、Cl 等有害元素耦

合反应机理及迁移转变机制(图 6), 揭示了氯化物催化脱除碱金属和锌的作用机理, 显著提升了烧结过程碱金属、锌的脱除率和烧结矿质量。随后, 又提出了转炉污泥与除尘废水最优的添加方式<sup>[65]</sup>, 实现了炼钢污泥与除尘废水无害化处理, 节约了生水消耗, 实现了“以废治废”。

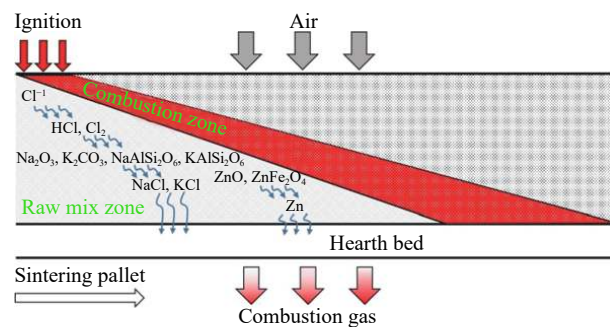


图 6 烧结过程中有害元素迁移示意图  
Fig.6 Schematic diagram of harmful elements migration during sintering

### 6.3 钢铁冶金尘泥高效处理熔融炉工艺

国内外对于含铁尘泥的处理主要有物理处理工艺、湿法和火法处理工艺。物理处理工艺一般仅仅作为预处理工艺，湿法处理工艺是通过浸出剂将粉尘中的氧化锌及其他金属氧化物浸出的方法，湿法处理工艺存在处理效率低、工序复杂的缺点。常见

的火法处理工艺有回转窑工艺、转底炉工艺、OxyCup工艺和DK工艺<sup>[66]</sup>。张建良等<sup>[67]</sup>创新设计了一种新型的适合中国国情的冶金尘泥高效处理熔融炉(图7)，开发了“尘泥冷压—高温熔炼”的短流程处理工艺，构建了熔融法工艺的能质平衡模型和冶炼仿真模型，提出了熔融炉高效低耗冶炼路线。

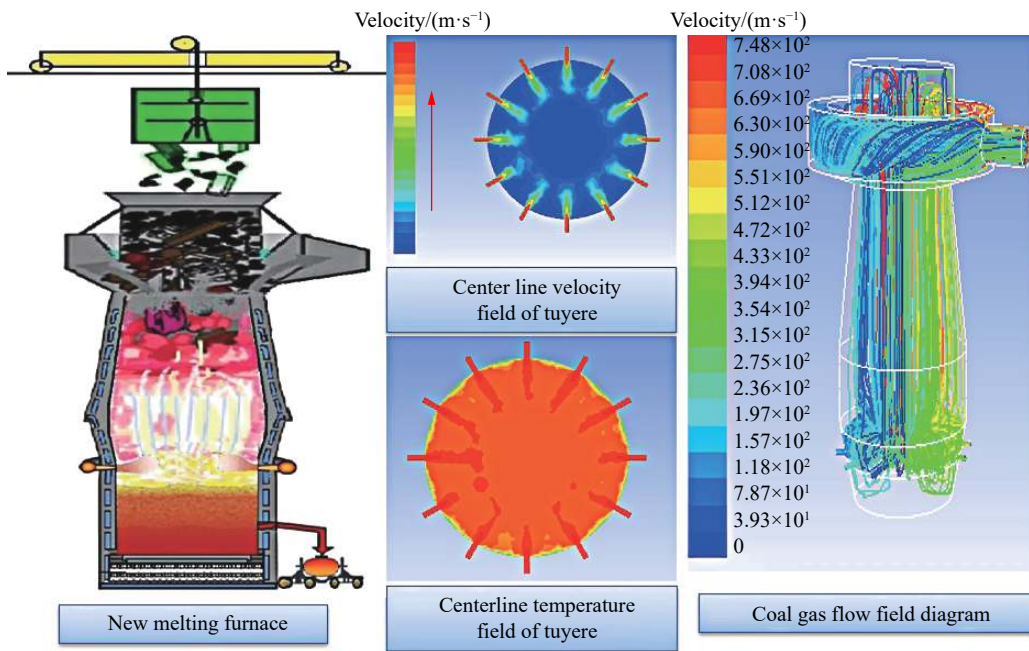


图7 新型熔融炉及其模拟场分布

Fig.7 New melting furnace and the simulated field distribution

## 7 非高炉炼铁技术

炼铁新工艺<sup>[68]</sup>包括直接还原工艺和熔融还原工艺。直接还原炼铁工艺是在铁矿石不熔化状态下采用煤或还原性气体(煤气、石油)作为热源和还原剂对铁的氧化物进行还原，获得固态直接还原铁的生产工艺；熔融还原工艺是采用非焦煤将铁矿石在反应器内进行还原获得液态铁水的生产工艺。目前，实现工业化生产的熔融还原炼铁工艺主要有Corex和HIs melt等。

如图8(a)所示，Corex炼铁工艺<sup>[69-71]</sup>是典型的两步熔融还原工艺。其中：在还原竖炉中进行固相预还原，在熔融气化炉中进行熔态终还原。我国宝钢建成了国内第一条Corex工艺生产线(C-3000装置)，宝钢COREX-3000<sup>[72]</sup>已正式搬迁至八钢，更名欧冶炉<sup>[73-75]</sup>，生产过程中放弃使用块煤，采用高反应性焦炭作为气化炉骨架。因此，气化炉拱顶区域煤气量和拱顶温度变化较大。为保证气化炉拱顶产生的煤气量充足且具有较高温度以便用于竖

炉还原，可在气化炉粉尘烧嘴处喷吹含碳燃料。

图8(b)中央SRV炉是整个HIs melt工艺的核心，熔融还原反应在SRV炉里进行，含有大量CO和CO<sub>2</sub>的煤气从SRV炉中通出，进行CO<sub>2</sub>脱除后，将CO浓度较高的煤气再通入到矿粉预热系统中，煤气中带入的热量可以对矿粉进行预热，提高预热温度，煤气的循环利用会提高HIs melt工艺中能源利用率。山东墨龙的工业实践取得了较为明显的效果，自从2016年6月第1次开炉至2017年底，山东墨龙HIs melt<sup>[76-77]</sup>最长连续运行时间已达110 d，超过力拓HIs melt工艺报道的最长连续运行时间65 d。山东墨龙HIs melt最大日均产量为1930 t，超过力拓HIs melt的最大日均产量1834 t，山东墨龙HIs melt<sup>[78-80]</sup>工厂所生产的特种铸造生铁磷质量分数较低，平均为0.015%~0.030%，基本不含硅、锰等元素，硫质量分数为0.03%~0.095%，其他5种五害元素(铅、锡、砷、锑和铋)含量非常低，能够满足高端制造业对高纯生铁的需求。

图8(c)所示为气基直接还原工艺图。气基直接

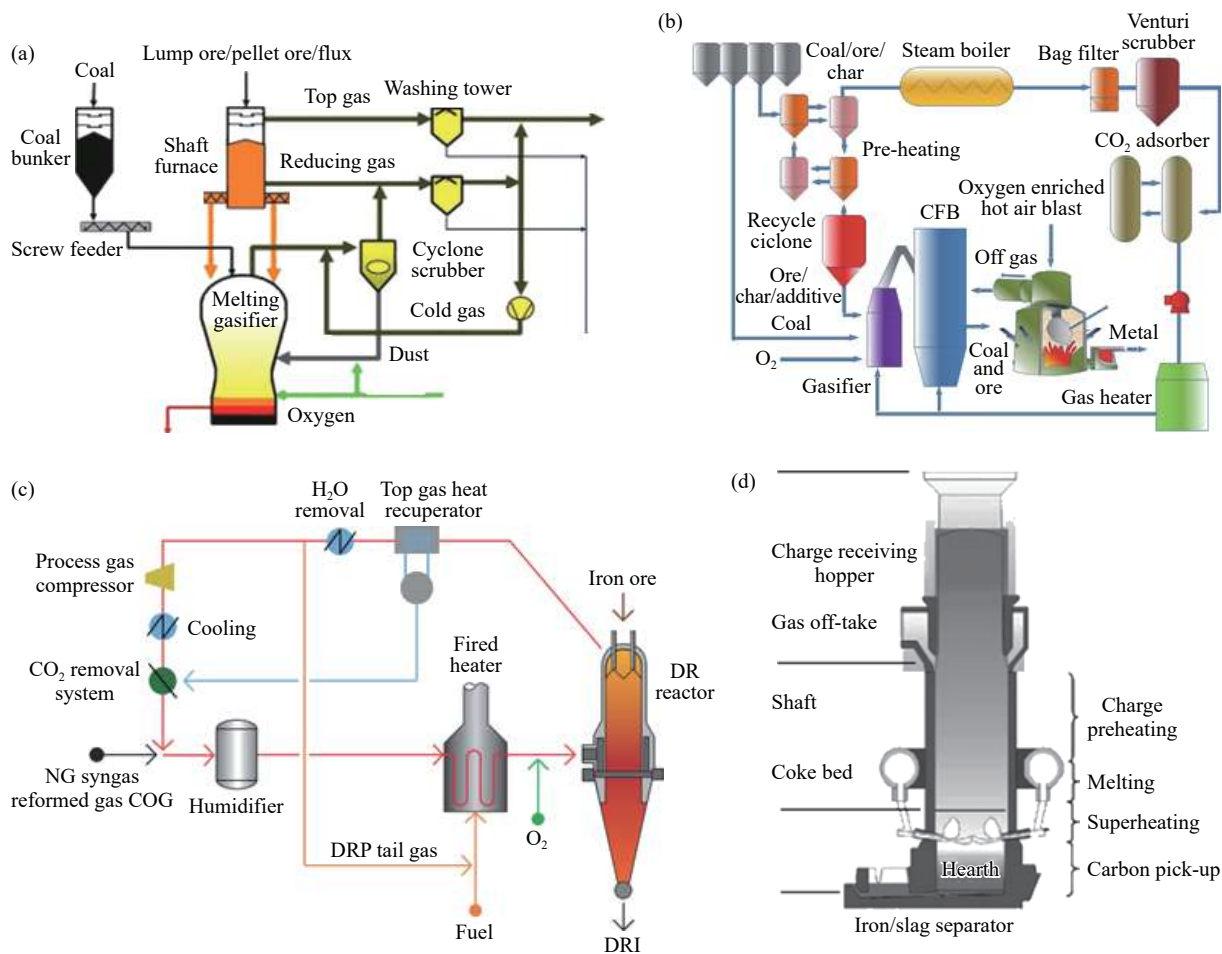


图 8 常见炼铁新技术工艺流程图。(a)Corex 工艺; (b)HIs melt 工艺; (c)气基直接还原工艺; (d)OxyCup 工艺

Fig.8 Process flow charts of common new ironmaking technology: (a) Corex process; (b) HIs melt process; (c) gas-based direct reduction process; (d) OxyCup process

还原<sup>[81]</sup>是在低于铁矿石熔点的温度下,采用还原气体将铁氧化物还原成高品位金属铁的方法<sup>[82-83]</sup>,由于直接还原铁脱氧过程中形成许多微孔,在显微镜下观看状似海绵,又称为海绵铁。目前,气基直接还原炼铁已形成工业化应用,规模最大的 Midrex 工艺年产海绵铁达到 4500 万吨,采用的还原气体为含 H<sub>2</sub> 和 CO 的富氢混合气体,因此,气基直接还原是一种基于氢冶金的炼铁技术。

图 8(d)所示为 OxyCup 工艺图。Li 等<sup>[84]</sup>和王桂林等<sup>[85]</sup>通过对典型 OxyCup(或 OxiCup)加热炉工艺的物料平衡和热平衡计算,首次得到了物料流动和热流图。分析了 OxyCup 工艺的主要燃料——焦炭和碳尘的性能,结果表明:焦炭主要作为炉料柱骨架和放热剂,还原能力较弱;而碳粉则混合在碳砖中以减少氧化铁。另外,将 OxyCup 工艺与传统高炉工艺进行对比,发现 OxyCup 工艺的还原和熔化过程相对孤立,而传统高炉工艺的还原和熔化过程在高温区相互混合。

## 8 炼铁反应过程微观模拟

### 8.1 冶金熔体微观结构和性能表征

在微观模拟方法未被应用到炼铁领域之前,由于冶金熔体高温的特点,前人对其微观结构的研究主要集中在冷却后的微观形貌,无法对高温形貌进行深入分析。分子动力学模拟的方法解决了高温物相表征的困难。目前,针对熔渣中典型成分的变化规律,张建良教授团队已经对 CaO、MgO、SiO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、FeO、MnO、B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 等组元对高炉炉渣微观形貌进行了研究。如图 9(a)所示,对比分析了酸性氧化物和碱性氧化物在炉渣中的作用差异。CaO、MgO、MnO、FeO、Na<sub>2</sub>O 作为网络编辑单元<sup>[86-90]</sup>,在炉渣中会解聚炉渣的微观网络,进而造成炉渣微观聚合度降低,从而导致炉渣流动性变差;反观 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 等两性氧化物在炉渣中随着含量的变化存在明显的转折点<sup>[91-93]</sup>,B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 由酸性转变为碱性的转折点要明显低于 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>。与此同时,利用分子动力学模拟的方法探究了高温

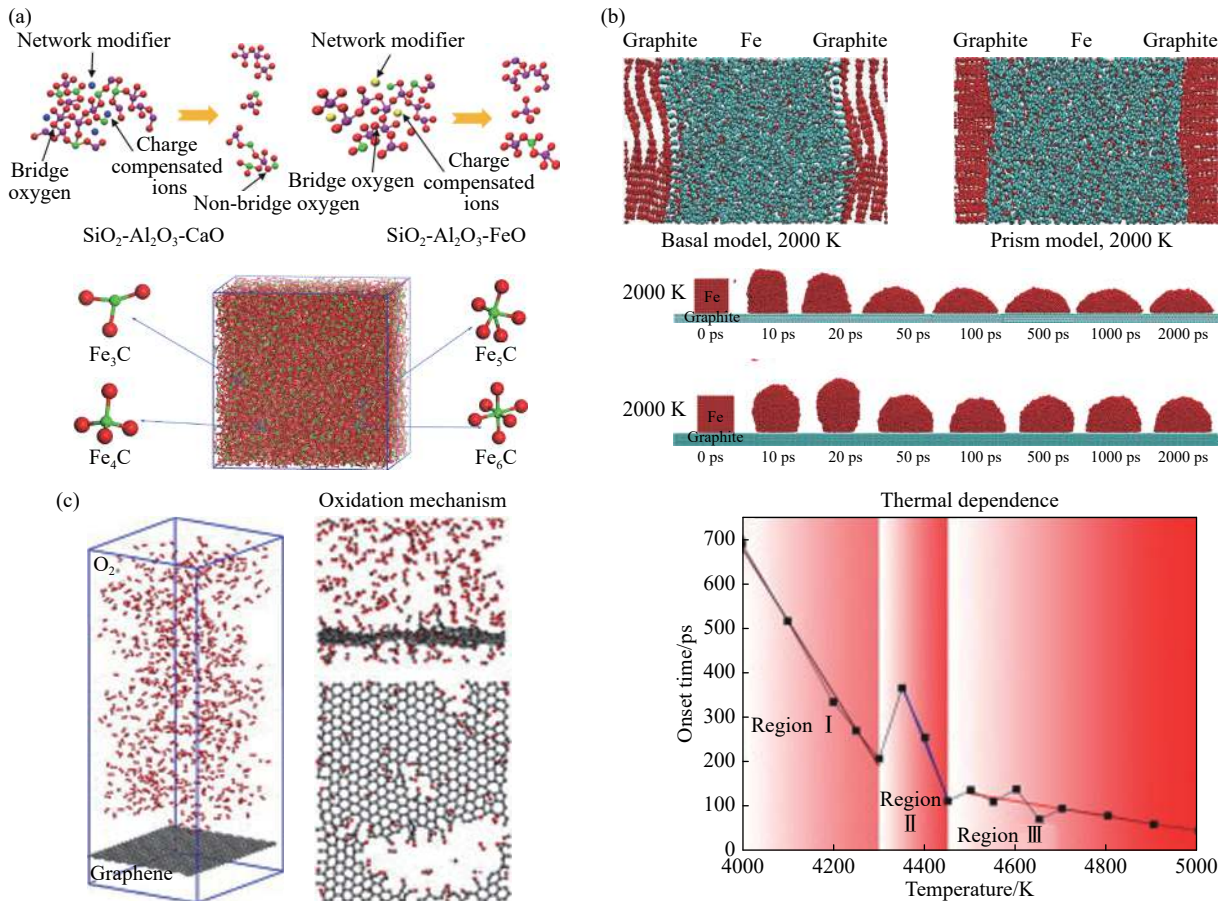


图9 (a)高温炉渣微观结构单元模型图和铁液熔体微观结构图<sup>[88]</sup>; (b)铁碳交互作用模型图和铁碳界面润湿行为模型图<sup>[95]</sup>; (c)碳的微观氧化反应过程机理图<sup>[97]</sup>

Fig.9 (a) Microstructure of the blast furnace slag and liquid iron<sup>[88]</sup>; (b) interaction model between iron and carbon and the wetting behavior between liquid iron and graphene<sup>[95]</sup>; (c) mechanism diagram of the carbon microscopic oxidation process<sup>[97]</sup>

铁液微观结构以及性质变化规律,发现高温铁液中存在 Fe<sub>3</sub>C、Fe<sub>4</sub>C、Fe<sub>5</sub>C、Fe<sub>6</sub>C 四种微观结构单元<sup>[94]</sup>.

### 8.2 熔体-焦炭界面交互作用行为

炉缸铁水渗碳对高炉长寿具有重要的作用,弄清铁水与焦炭的微观交互作用行为,对提高高炉冶炼效率具有重要意义. Jiang 等<sup>[95]</sup>利用反应分子动力学方法研究了铁水渗碳微观过程,对比分析了不同温度下石墨不同晶体取向与铁水反应的过程机理,如图9(b)所示. 结果发现,石墨上碳原子可以分别以单原子碳、双原子碳链和三原子碳链的形式从石墨中剥离并扩散到铁水中,且高温可以有效促进渗碳反应的发生. 为了进一步明晰铁水与石墨接触初始过程的变化规律, Jiang 等<sup>[96]</sup>利用微观模拟的方法探究了铁-石墨界面润湿行为,如图9(b)所示. 结果发现碳质材料不同接触面与铁水的润湿角存在明显差异,石墨平面对铁水呈现良好的润湿性,而石墨棱柱面对铁水则呈现疏水性.

### 8.3 化学反应微观机理

碳质材料在高温条件下往往会发生一系列的反应,例如热解、气化等,碳质材料的结构会发生明显变化. Li 等<sup>[97]</sup>利用反应力场对碳质材料燃烧和碳的气化过程进行了深入研究,如图9(c)所示. 在燃烧研究中发现,在氧化开始的时间内存在异常的热行为,在成核生长机理和反应动力学方面存在明显差异,进一步提高了对碳在原子尺度上氧化的认识. 在气化研究中发现,在中间(4200~4400 K)温度区观察到异常的热解行为,由于形成了相对稳定的中间结构,中间温度区域的气化速率大大降低. 发现石墨化程度较高的碳质材料中,单空位缺陷的存在只会在温度较低的情况下会促进反应动力学,在高温条件下的影响反而很小<sup>[98]</sup>.

## 9 国内外低碳炼铁发展近况

### 9.1 富氢高炉的探索与实践

2020年8月,德国迪林根和萨尔钢铁投资1400万欧元,在高炉中喷吹富氢焦炉煤气,未来该

厂可以转换为全氢冶炼, 并计划到 2035 年将碳排放量减少 40%。

日本 COURSE50 项目<sup>[99]</sup>使用富氢高炉还原与 CO<sub>2</sub> 捕集回收两项技术实现高炉炼铁的二氧化碳减排。新日铁建设了一座产能为 35 t·d<sup>-1</sup> 的 12 m<sup>3</sup> 实验高炉, 确定了通过氢还原炼铁将二氧化碳排放减少 10%, 通过二氧化碳回收将二氧化碳排放减少 20% 的减排目标。

中国宝武已与中核集团清华大学于 2019 年 1 月 15 日签订《核能-制氢-冶金耦合技术战略合作框架协议》, 共同打造世界领先的核冶金产业联盟。其思路即是利用核能制氢实现氢冶金, 目标为基本解决炼铁燃煤限制问题, 降低 CO<sub>2</sub> 排放 30%, 形成宝武特有的低碳炼铁技术。

## 9.2 低碳非高炉炼铁发展近况

中晋冶金科技有限公司于 2020 年 12 月 20 日宣布其氢基还原铁项目点火试车, 这一典型的氢基直接还原铁项目(CSDRI)工艺正式进入工业应用阶段。山西中晋 CSDRI 技术——气基竖炉还原铁技术是当今世界上最先进的炼铁技术之一, 是以天然气为气源重整制成合格的 CO+H<sub>2</sub> 还原气, 与氧化球团通过气固相反应, 生产出直接还原铁的过程。该工艺具有高效、节能、减排的特点, 产品是冶炼优质钢的最佳原料。我国由于缺乏天然气资源, 国内钢铁行业科研院所及企业技术专家多年持续关注和研究气基竖炉还原铁技术, 但是限于对气源的研究瓶颈, 在中国一直未能实现气基竖炉还原铁技术突破。

河钢集团已经与意大利特诺恩集团(Tenova)签署了谅解备忘录(MOU), 利用世界最先进的制氢和氢还原技术, 并联手冶金京诚工程技术有限公司共同研发、建设全球首例 120 万吨规模的氢冶金示范工程。河钢集团与特诺恩于 2020 年 11 月 23 日签订了合同, 建设高科技的氢能源开发和利用工程, 包括一座年产 60 万吨的 ENERGIIRON 直接还原厂, 这将是全球首座使用富氢气体的直接还原铁工业化生产厂。

建龙 CISP 工艺是一种新型的氢基熔融还原炼铁新工艺。还原剂选择煤粉加焦炉煤气。其主反应为:



该项目发展将分为四个战略阶段。第一阶段: 降低 C 的占比, 提高 CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> 喷吹, 实现煤+COG 熔

融还原炼铁工艺。第二阶段: 逐渐降低 CH<sub>4</sub> 与 H<sub>2</sub> 的比例, 提高 H<sub>2</sub> 喷吹量, 实现纯 COG 熔融还原炼铁工艺。第三阶段: 期望使用纯 H<sub>2</sub>, 实现纯氢熔融还原炼铁工艺。第四阶段: 将引入 H<sup>+</sup> 与 H, 实现等离子氢熔融还原炼铁工艺。

## 10 结论

在全球“脱碳”大潮的背景下, 以减少碳足迹、降低碳排放为中心的炼铁工艺正在进行工艺变革, 低碳绿色发展已经成为钢铁行业未来发展的大趋势。碳达峰与碳中和计划的提出为我国低碳发展明确了新方向, 同时也对我国钢铁工业铁前工序的发展提出了新的要求。高炉作为传统炼铁工艺, 仍然是未来几十年炼铁工业的核心, 对传统炼铁工序进行升级改造势在必行。同时, 氢冶金在未来钢铁行业发展中具有重要意义, 非高炉炼铁工艺方兴未艾, 世界各国都在低碳冶金方面投入大量资金、格外重视, 非高炉工艺正在加速发展; 新的时代背景要求我们要重视炼铁工业在低碳方面的多元化发展。

## 参 考 文 献

- [1] Wang Z Y, Zhang J L, Liu Z J, et al. Status, technological progress, and development directions of the ironmaking industry in China. *Ironmak Steelmak*, 2019, 46(10): 937
- [2] Cui L, Ba K M, Li F Q, et al. Life cycle assessment of ultra-low treatment for steel industry sintering flue gas emissions. *Sci Total Environ*, 2020, 725: 138292
- [3] Wang Y Z, Liu Z J, Zhang J L, et al. Study of stand-support sintering to achieve high oxygen potential in iron ore sintering to enhance productivity and reduce CO content in exhaust gas. *J Clean Prod*, 2020, 252: 119855
- [4] Zhang J L, Kan Y H, Zhang S J, et al. Application of full active lime intensified sintering technology in ultra-thick layer. *Iron Steel*, 2020, 55(8): 56  
(张建良, 阚永海, 张士军, 等. 全活性石灰强化烧结技术在超厚料层中的应用. *钢铁*, 2020, 55(8): 56)
- [5] Liu Z J, Niu L L, Zhang S J, et al. Comprehensive technologies for iron ore sintering with a bed height of 1000 mm to improve sinter quality, enhance productivity and reduce fuel consumption. *ISIJ Int*, 2020, 60(11): 2400
- [6] Wang R R, Zhang J L, Liu Z J, et al. Interaction between iron ore and magnesium additives during induration process of pellets. *Powder Technol*, 2020, 361: 894
- [7] Chen J W, Jiao Y, Wang X D. Thermodynamic studies on gas-based reduction of vanadium titano-magnetite pellets. *Int J Miner Metall Mater*, 2019, 26(7): 822
- [8] Wang Z C, Chu M S, Tang J, et al. Effects of reducing atmosphere

- and gangue composition on reduction swelling of oxidized pellets. *J Northeast Univ (Nat Sci)*, 2012, 33(1): 94  
(王兆才, 储满生, 唐珏, 等. 还原气氛和脉石成分对氧化球团还原膨胀的影响. *东北大学学报(自然科学版)*, 2012, 33(1): 94)
- [9] Liu Z G, Chu M S, Wang H T, et al. Effect of MgO content in sinter on the softening-melting behavior of mixed burden made from chromium-bearing vanadium-titanium magnetite. *Int J Miner Metall Mater*, 2016, 23(1): 25
- [10] Liu Z J, Cheng Q, Li K J, et al. The interaction of nanoparticulate Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in the sintering process: A molecular dynamics simulation. *Powder Technol*, 2020, 367: 97
- [11] Wang Y Z, Schenk J, Zhang J L, et al. Novel sintering indexes to evaluate and correlate the crystal characteristics and compressive strength in magnetite pellets. *Powder Technol*, 2020, 362: 517
- [12] Wang R R, Zhang J L, Liu Z J, et al. Effect of lime addition on the mineral structure and compressive strength of magnesium containing pellets. *Powder Technol*, 2020, 376: 222
- [13] Yan B J, Xing Y, Lu P, et al. A critical review on the research progress of multi-pollutant collaborative control technologies of sintering flue gas in the iron and steel industry. *Chin J Eng*, 2018, 40(7): 767  
(闫伯骏, 邢奕, 路培, 等. 钢铁行业烧结烟气多污染物协同净化技术研究进展. *工程科学学报*, 2018, 40(7): 767)
- [14] Iwami Y, Iwase K, Hirosawa T, et al. Development of gas fuel injection technology in iron ore sintering process // 2015-Sustainable Industrial Processing Summit. Antalya, 2015, 3: 183
- [15] Zhou W T, Hu J G, Guo Y L. New sintering technologies and analysis on prospect of popularization in China. *World Iron Steel*, 2011, 11(6): 47  
(周文涛, 胡俊鸽, 郭艳玲. 烧结新技术及其在国内的推广前景分析. *世界钢铁*, 2011, 11(6): 47)
- [16] Li K J, Zhang J L, Barati M, et al. Influence of alkaline (Na, K) vapors on carbon and mineral behavior in blast furnace cokes. *Fuel*, 2015, 145: 202
- [17] Li K J, Khanna R, Bouhadja M, et al. A molecular dynamic simulation on the factors influencing the fluidity of molten coke ash during alkalization with K<sub>2</sub>O and Na<sub>2</sub>O. *Chem Eng J*, 2017, 313: 1184
- [18] Li K J, Khanna R, Zhang J L, et al. Molecular dynamics investigation on coke ash behavior in the high-temperature zones of a blast furnace: Influence of alkalis. *Energy Fuels*, 2017, 31(12): 13466
- [19] Li K J, Zhang J L, Liu Y X, et al. Graphitization of coke and its interaction with slag in the hearth of a blast furnace. *Metall Mater Trans B*, 2016, 47(2): 811
- [20] Li K J, Zhang J L, Sun M M, et al. Existence state and structures of extracted coke and accompanied samples from tuyere zone of a large-scale blast furnace. *Fuel*, 2018, 225: 299
- [21] Sun M M, Zhang J L, Li K J, et al. Dissolution behaviors of various carbonaceous materials in liquid iron: Interaction between graphite and iron. *JOM*, 2019, 71(12): 4305
- [22] Sun M M, Zhang J L, Li K J, et al. The interfacial behavior between coke and liquid iron: A comparative study on the influence of coke pore, carbon structure and ash. *JOM*, 2020, 72(6): 2174
- [23] Sun M M, Zhang J L, Zhang L, et al. Investigation of the microstructure interaction mechanism of coke-slag-metal in deadman of blast furnace. *Ironmak Steelmak*, 2021: 1
- [24] Sun M M, Pang K L, Zhang J L, et al. *In situ* monitoring and dissolution limit of carbon dissolution in hot metal. *Steel Res Int*, 2021, 92(10): 2100111
- [25] Ning X J, Dang H, Zhang J L, et al. Research progress of low-order coal pyrolysis process and semi-coke production process. *Iron Steel*, 2021, 56(1): 1  
(宁晓钧, 党哈, 张建良, 等. 低阶煤热解与兰炭生产工艺研究进展. *钢铁*, 2021, 56(1): 1)
- [26] Bai F Q, Wang X D. Commercial test of injecting semi-coke in No.3 BF of Xinxing ductile. *Ironmaking*, 2019, 38(3): 16  
(白凤强, 王小东. 新兴铸管3号高炉喷吹兰炭工业试验. *炼铁*, 2019, 38(3): 16)
- [27] Gong L W. Semi-coke coal injection practice in Taiyuan steel's BF. *Ironmaking*, 2018, 37(5): 16  
(巩黎伟. 太钢高炉喷吹兰炭煤生产实践. *炼铁*, 2018, 37(5): 16)
- [28] Wang H Y, Zhang J L, Wang G W, et al. Industrial test of BF injected with upgraded pulverized coal. *Ironmaking*, 2018, 37(1): 24  
(王海洋, 张建良, 王广伟, 等. 高炉喷吹提质煤粉的工业试验. *炼铁*, 2018, 37(1): 24)
- [29] Wang G W, Zhang J L, Shao J G, et al. Thermal behavior and kinetic analysis of co-combustion of waste biomass/low rank coal blends. *Energy Convers Manag*, 2016, 124: 414
- [30] Wang G W, Zeng Y, Zhang J L, et al. Study on blending optimization of pulverized coal injection into blast furnace of ansteel. *Angang Technol*, 2021(1): 1  
(王广伟, 曾宇, 张建良, 等. 鞍钢高炉喷煤优化搭配研究. *鞍钢技术*, 2021(1): 1)
- [31] Wang H F, Zhang C X, Hu C Q, et al. Important development trends of coke oven gas utilization in steel plant. *J Iron Steel Res*, 2008, 20(3): 1  
(王海风, 张春霞, 胡长庆, 等. 钢铁企业焦炉煤气利用的一个重要发展方向. *钢铁研究学报*, 2008, 20(3): 1)
- [32] Chen Y X, Wang G W, Zhang J L, et al. Theoretical analysis of injecting coke oven gas with oxygen enriched into blast furnace. *Iron Steel*, 2012, 47(2): 12  
(陈永星, 王广伟, 张建良, 等. 高炉富氧喷吹焦炉煤气理论研究. *钢铁*, 2012, 47(2): 12)
- [33] Kidnay A J, Parrish W R, McCartney D G. *Fundamentals of Natural Gas Processing*. Boca Raton: CRC Press, 2019
- [34] Ma Y K, Nie B S, He X Q, et al. Mechanism investigation on coal and gas outburst: An overview. *Int J Miner Metall Mater*, 2020, 27(7): 872
- [35] Roy S K, Nayak D, Dash N, et al. Microwave-assisted reduction

- roasting —magnetic separation studies of two mineralogically different low-grade iron ores. *Int J Miner Metall Mater*, 2020, 27(11): 1449
- [36] Wang P, Zhang J L, Wang G W, et al. Analysis of basic characteristics of Arundo donax char prepared by pyrolysis. *China Metall*, 2019, 29(2): 12  
(王朋, 张建良, 王广伟, 等. 热解制备芦竹半焦基础性能分析. 中国冶金, 2019, 29(2): 12)
- [37] McKendry P. Energy production from biomass (part 1): Overview of biomass. *Bioresour Technol*, 2002, 83(1): 37
- [38] Wang G W, Zhang J L, Chang W W, et al. Structural features and gasification reactivity of biomass chars pyrolyzed in different atmospheres at high temperature. *Energy*, 2018, 147: 25
- [39] Zhang J L, Lin X H, Kong D W, et al. Combustion characteristics and kinetic analysis of biomass char and coal blends. *J Univ Sci Technol Beijing*, 2012, 34(3): 348  
(张建良, 林祥海, 孔德文, 等. 生物质焦与煤混合燃烧特性及动力学分析. 北京科技大学学报, 2012, 34(3): 348)
- [40] Zuo H B, Wang C, Zhang J L, et al. Application status and important technical indexes of BF hearth refractory. *Iron Steel*, 2015, 50(2): 1  
(左海滨, 王聪, 张建良, 等. 高炉炉缸耐火材料应用现状及重要技术指标. 钢铁, 2015, 50(2): 1)
- [41] Jiao K X, Zhang J L, Zuo H B, et al. Composition and formation mechanism of viscous layers in blast furnace hearth. *J Northeast Univ (Nat Sci)*, 2014, 35(7): 987  
(焦克新, 张建良, 左海滨, 等. 高炉炉缸黏滞层物相及形成机理. 东北大学学报(自然科学版), 2014, 35(7): 987)
- [42] Zuo H B, Wang C, Zhang J L, et al. Oxidation behavior and kinetics of  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiC-SiO}_2\text{-C}$  composite in air. *Ceram Int*, 2015, 41(7): 9093
- [43] Liu Y X, Liu F J, Zhang J L, et al. Oxidation behavior of carbon composite bricks used in blast furnace hearth in steam. *Bull Chin Ceram Soc*, 2017, 36(2): 519  
(刘彦祥, 刘福军, 张建良, 等. 高炉炉缸用碳复合砖在水蒸气条件下的氧化行为研究. 硅酸盐通报, 2017, 36(2): 519)
- [44] Jiao K X, Fan X Y, Zhang J L, et al. Corrosion behavior of alumina-carbon composite brick in typical blast furnace slag and iron. *Ceram Int*, 2018, 44(16): 19981
- [45] Liu Q, Cheng S S, Zhao H B, et al. Thermal deformation analysis of copper-steel composite staves. *Chin J Eng*, 2016, 38(1): 108  
(刘奇, 程树森, 赵宏博, 等. 铜钢复合冷却壁热变形分析. 工程科学学报, 2016, 38(1): 108)
- [46] Deng Y, Jiao K X, Wu Q C, et al. Damage mechanism of copper stave used in blast furnace. *Ironmak Steelmak*, 2018, 45(10): 886
- [47] Zhang H, Jiao K X, Zhang J L, et al. A new method for evaluating cooling capacity of blast furnace cooling stave. *Ironmak Steelmak*, 2019, 46(7): 671
- [48] Zhang H, Zhang J L, Jiao K X, et al. Analysis on cooling capacity and thermal deformation of copper-steel composite cooling stave. *Ironmaking*, 2018, 37(1): 10  
(张恒, 张建良, 焦克新, 等. 铜钢复合冷却壁传热能力及热变形分析. 炼铁, 2018, 37(1): 10)
- [49] Zhang H, Jiao K X, Zhang J L, et al. Experimental and numerical investigations of interface characteristics of copper/steel composite prepared by explosive welding. *Mater Des*, 2018, 154: 140
- [50] Jiang D W, Wang Z Y, Zhang J L, et al. Predictive modelling for contact angle of liquid metals and oxide ceramics by comparing Gaussian process regression with other machine learning methods. *Ceram Int*, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2021.09.146>
- [51] Wang Z Y, Dai J H, Jiang D W, et al. Optimization of blast furnace charging system combining data traceability and numerical simulation. *China Metall*, 2020, 30(11): 11  
(王振阳, 戴建华, 江德文, 等. 结合数据追溯与数值模拟的高炉布料制度优化. 中国冶金, 2020, 30(11): 11)
- [52] Jiang D W, Zhang J L, Wang Z Y, et al. A prediction model of blast furnace slag viscosity based on principal component analysis and K-nearest neighbor regression. *JOM*, 2020, 72(11): 3908
- [53] Wang Z Y, Jiang D W, Wang X D, et al. Prediction of blast furnace hot metal temperature based on support vector regression and extreme learning machine. *Chin J Eng*, 2021, 43(4): 569  
(王振阳, 江德文, 王新东, 等. 基于支持向量回归与极限学习机的高炉铁水温度预测. 工程科学学报, 2021, 43(4): 569)
- [54] Liu X Y, Liu X G, Wang W H. Application of Bayesian network to predicting silicon content in hot metal. *Iron Steel*, 2005, 40(3): 17  
(刘学艺, 刘祥官, 王文慧. 贝叶斯网络在高炉铁水硅含量预测中的应用. 钢铁, 2005, 40(3): 17)
- [55] Jezierski J, Janerka K. Selected aspects of metallurgical and foundry furnace dust utilization. *Pol J Environ Stud*, 2011, 20(1): 101
- [56] Liu Z J, Wang G W, Zhang J L, et al. Study on  $\text{CO}_2$  gasification reactivity and structure characteristics of carbonaceous materials from the corex furnace. *Energy Fuels*, 2018, 32(5): 6155
- [57] Li Y, Zhang J L, Liu Z J, et al. Reduction mechanism of iron oxide briquettes by carbonaceous materials extracted from blast furnace dust. *Metall Mater Trans B*, 2019, 50(5): 2296
- [58] Wang Y Z, Liu Z J, Zhang J L, et al. Advanced converter sludge utilization technologies for the recovery of valuable elements: A review. *J Hazard Mater*, 2020, 381: 120902
- [59] Júnior J H N, Contrucci M A, D'Abreu J C. Tecnored process - high potential in using different kinds of solid fuels. *Mat Res*, 2005, 8(4): 447
- [60] Fisch T, Kessler K. OxyCup shaft furnace of Thyssen Krupp Steel Strategy for economic recycling of fine grained ferrous and carbonaceous residues // *Proceedings of Environmental Seminar*. Beijing, 2006: 90
- [61] McClelland J M, Metius G E. Recycling ferrous and nonferrous waste streams with FASTMET. *JOM*, 2003, 55(8): 30
- [62] Kikuchi S, Ito S, Kobayashi I, et al. ITmk3 process. *Kobelco Technology Review*, 2010, 29: 77
- [63] Wang F, Zhang J L, Mao R, et al. Bonding mechanism and

- strength deterioration of self-reducing briquettes made from iron-bearing dust and sludge. *J Central South Univ (Sci Technol)*, 2016, 47(2): 367  
(王飞, 张建良, 毛瑞, 等. 含铁尘泥自还原团块固结机理及强度劣化. *中南大学学报(自然科学版)*, 2016, 47(2): 367)
- [64] Wang Y Z, Zhang J L, Liu Z J, et al. Co-utilization of converter sludge-containing dedust wastewater in iron ore sintering to save fresh water, enhance quality and reduce pollution. *J Clean Prod*, 2019, 234: 157
- [65] Liu Z J, Zhang J L, Du C B, et al. *Treatment Technic for Sintering added Steelmaking Sludge*: China Patent, 201910019375.5. 2020-3-31  
(刘征建, 张建良, 杜诚波, 等. 一种烧结配加炼钢污泥的处理工艺方法: 中国专利, 201910019375.5. 2020-3-31)
- [66] Mao R, Zhang J L, Liu Z J, et al. Experimental studies on self-reduction for the pellets made of iron-contained dust and sludge from a steel enterprise. *J Northeast Univ (Nat Sci)*, 2015, 36(6): 790  
(毛瑞, 张建良, 刘征建, 等. 钢铁厂含铁尘泥球团自还原实验研究. *东北大学学报(自然科学版)*, 2015, 36(6): 790)
- [67] Zhang J L, Wang J Y, Liu Z J, et al. *A Smelting Furnace Steel Mill Solid Waste Treatment Process for*: China Patent, 201310659226.8. 2014-3-5  
(张建良, 王俊英, 刘征建, 等. 一种熔融炉处理钢铁厂固体废料工艺方法: 中国专利, 201310659226.8. 2014-3-5)
- [68] Zhang X Y, Jiao K X, Zhang J L, et al. A review on low carbon emissions projects of steel industry in the World. *J Clean Prod*, 2021, 306: 127259
- [69] Xu R S, Zhang J L, Wang W, et al. Dissolution kinetics of solid fuels used in COREX gasifier and its influence factors. *J Iron Steel Res Int*, 2018, 25(3): 298
- [70] Xu R S, Zhang J L, Wang G W, et al. Isothermal kinetic analysis on fast pyrolysis of lump coal used in COREX process. *J Therm Anal Calorim*, 2016, 123(1): 773
- [71] Xu R S, Zhang J L, Wang G W, et al. Devolatilization characteristics and kinetic analysis of lump coal from China COREX3000 under high temperature. *Metall Mater Trans B*, 2016, 47(4): 2535
- [72] Wang H Y, Zhang J L, Wang G W, et al. Feasibility research of injection of BF dust into melter gasifier of COREX. *Iron Steel*, 2017, 52(8): 29  
(王海洋, 张建良, 王广伟, 等. 高炉除尘灰用于COREX气化炉喷吹的可行性研究. *钢铁*, 2017, 52(8): 29)
- [73] Zhou H, Wu S L, Kou M Y, et al. Physical simulation of the position and evolution process of dust accumulation in the bustle pipe of a COREX shaft furnace. *Chin J Eng*, 2018, 40(3): 349  
(周恒, 吴胜利, 寇明银, 等. COREX竖炉围管堵塞位置及其演变过程的物理模拟. *工程科学学报*, 2018, 40(3): 349)
- [74] Wang H Y, Zhang J L, Wang G W, et al. Balance analysis of alkali metals and Zinc in European metallurgical furnace of Bayi Steel. *Ironmaking*, 2018, 37(4): 61  
(王海洋, 张建良, 王广伟, 等. 八钢欧冶炉碱金属及锌平衡分析. *炼铁*, 2018, 37(4): 61)
- [75] Du B B, Wu S L, Zhou H, et al. Effect of scaffolding on solid flow in COREX shaft furnace by discrete element simulation method. *Iron Steel*, 2020, 55(1): 12  
(杜斌斌, 吴胜利, 周恒, 等. COREX竖炉结瘤对物料运动行为影响的DEM模拟. *钢铁*, 2020, 55(1): 12)
- [76] Zhang J L, Zhang G Q, Liu Z J, et al. Production overview and main characteristics of HIs melt process in Shandong Molong. *China Metall*, 2018, 28(5): 37  
(张建良, 张冠琪, 刘征建, 等. 山东墨龙HIs melt工艺生产运行概况及主要特点. *中国冶金*, 2018, 28(5): 37)
- [77] Zhang J L, Li K J, Zhang G Q, et al. Technological innovation of HIs melt process in SD molong and latest production index. *Ironmaking*, 2018, 37(2): 56  
(张建良, 李克江, 张冠琪, 等. 山东墨龙HIs melt工艺的技术创新及最新生产指标. *炼铁*, 2018, 37(2): 56)
- [78] Wu L F, Yang G Q, Ma B L. Development history and improvement direction of HIs melt smelting reduction process. *Hebei Metall*, 2021(9): 8  
(武龙飞, 杨广庆, 马保良. HIs melt熔融还原工艺的发展历程及改进方向. *河北冶金*, 2021(9): 8)
- [79] Cao C Z, Meng Y J, Yan F X, et al. Analysis on energy efficiency and optimization of HIs melt process // *Energy Technology* 2019. *San Antonio*, 2019: 3
- [80] Ma H B, Jiao K X, Zhang J L. The influence of basicity and  $TiO_2$  on the crystallization behavior of high Ti-bearing slags. *CrystEngComm*, 2020, 22(2): 361
- [81] Zhang B, Zhang J L, Liu X L, et al. Effect of reduction conditions on metallization rate of pellets in gas-based reduction. *China Metall*, 2014, 24(Suppl 1): 166  
(张波, 张建良, 刘兴乐, 等. 还原条件对气基还原中球团金属化率的影响. *中国冶金*, 2014, 24(增刊 1): 166)
- [82] Yi L Y, Huang Z C, Peng H, et al. Action rules of  $H_2$  and CO in gas-based direct reduction of iron ore pellets. *J Central South Univ*, 2012, 19(8): 2291
- [83] Li W, Wang N, Fu G Q, et al. Influence of roasting characteristics on gas-based direct reduction behavior of Hongge vanadium titanomagnetite pellet with simulated shaft furnace gases. *Powder Technol*, 2017, 310: 343
- [84] Li K J, Zhang J L, Liu Z J, et al. Comprehensive evaluation of OxyCup process for steelmaking dust treatment based on calculation of mass balance and heat balance. *J Iron Steel Res Int*, 2014, 21(6): 575
- [85] Wang G L, Liu Z J, Zhang J L, et al. Soft-melting property of dust briquettes based on OxyCup shaft furnace. *China Metall*, 2018, 28(11): 61  
(王桂林, 刘征建, 张建良, 等. 基于OxyCup竖炉处理工艺的尘泥团块软熔性能. *中国冶金*, 2018, 28(11): 61)
- [86] Jiang C H, Xiong Z X, Bu Y S, et al. Study on the structure and properties of high-calcium coal ash in the high-temperature zone of

- a blast furnace: A molecular dynamics simulation investigation. *JOM*, 2020, 72(7): 2713
- [87] Jiang C H, Li K J, Zhang J L, et al. Effect of MgO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ratio on the structure and properties of blast furnace slags: A molecular dynamics simulation. *J Non Cryst Solids*, 2018, 502: 76
- [88] Jiang C H, Li K J, Zhang J L, et al. Molecular dynamics simulation on the effect of MgO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ratio on structure and properties of blast furnace slag under different basicity conditions. *Metall Mater Trans B*, 2019, 50(1): 367
- [89] Jiang C H, Li K J, Zhang J L, et al. The effect of CaO(MgO) on the structure and properties of aluminosilicate system by molecular dynamics simulation. *J Mol Liq*, 2018, 268: 762
- [90] Jiang C H, Li K J, Zhang J L, et al. The effect of CaO and MgO on the structure and properties of coal ash in the blast furnace: A molecular dynamics simulation and thermodynamic calculation. *Chem Eng Sci*, 2019, 210: 115226
- [91] Bi Z S, Li K J, Jiang C H, et al. Performance and transition mechanism from acidity to basicity of amphoteric oxides (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) in SiO<sub>2</sub>-CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system: A molecular dynamics study. *Ceram Int*, 2021, 47(9): 12252
- [92] Bi Z S, Li K J, Jiang C H, et al. Effects of B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> on the structure and properties of blast furnace slag by molecular dynamics simulation. *J Non Cryst Solids*, 2021, 551: 120412
- [93] Bi Z S, Li K J, Jiang C H, et al. Effects of amphoteric oxide (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) on the structure and properties of SiO<sub>2</sub>-CaO melts by molecular dynamics simulation. *J Non Cryst Solids*, 2021, 559: 120687
- [94] Jiang C H, Li K J, Zhang J L, et al. Structural characteristics of liquid iron with various carbon contents based on atomic simulation. *J Mol Liq*, 2021, 342: 116957
- [95] Jiang C H, Zhang J L, Li K J, et al. Influence of graphite crystalline orientation on the carbon dissolution reaction in liquid iron: A ReaxFF molecular dynamics simulation study. *J Mol Liq*, 2021, 335: 115688
- [96] Jiang C H, Xiong Z X, Li K J, et al. Molecular dynamics simulation study on the wetting behavior of liquid iron and graphite. *J Mol Liq*, 2020, 311: 113350
- [97] Li K J, Khanna R, Zhang H, et al. Thermal behaviour during initial stages of graphene oxidation: Implications for reaction kinetics and mechanisms. *Chem Eng J*, 2021, 421: 129742
- [98] Li K J, Khanna R, Zhang H, et al. Thermal behaviour, kinetics and mechanisms of CO<sub>2</sub> interactions with graphene: An atomic scale reactive molecular dynamic study. *Chem Eng J*, 2021, 425: 131529
- [99] Tonomura S. Outline of course 50. *Energy Procedia*, 2013, 37: 7160