

# 高磷赤铁矿直接还原过程中不同添加剂脱磷的性能对比及分子动力学模拟研究<sup>①</sup>

钟志刚, 李宗蔚, 杨备, 罗良飞

(长沙矿冶研究院有限责任公司, 湖南长沙 410012)

**摘要:** 通过试验对比了高磷赤铁矿直接还原焙烧过程中不同添加剂  $\text{CaCO}_3$ 、 $\text{Na}_2\text{CO}_3$ 、 $\text{CaF}_2$  的脱磷性能, 结果表明,  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  的脱磷性能更好,  $\text{CaCO}_3$  次之。利用分子动力学模拟统计计算使用 3 种不同添加剂后体系在焙烧过程中的桥氧分布和氧原子均方位移, 查明了高磷赤铁矿直接还原过程中  $\text{CaCO}_3$ 、 $\text{Na}_2\text{CO}_3$ 、 $\text{CaF}_2$  的脱磷机制, 结果表明, 添加剂脱磷的作用机制是提高体系中自由氧含量或提高体系中氧原子的均方位移, 减少体系中 Si、P 共用氧原子, 从而抑制磷灰石的还原; 添加剂脱磷性能与体系中氧原子均方位移呈正相关的规律。

**关键词:** 分子动力学模拟; 直接还原; 高磷赤铁矿; 脱磷; 脱磷剂; 磷灰石; 自由氧; 均方位移

中图分类号: TD925

文献标识码: A

doi: 10.3969/j.issn.0253-6099.2024.02.021

文章编号: 0253-6099(2024)02-0083-05

## Comparison of Dephosphorization Performance of Different Additives in Direct Reduction of High-Phosphorus Hematite and Molecular Dynamics Simulation

ZHONG Zhigang, LI Zongwei, YANG Bei, LUO Liangfei

(Changsha Research Institute of Mining and Metallurgy Co Ltd, Changsha 410012, Hunan, China)

**Abstract:** Experiments were carried out to compare dephosphorization performance of  $\text{CaCO}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  and  $\text{CaF}_2$  in direct reduction roasting process of high-phosphorus hematite. It is found that  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  presents the best dephosphorization performance, followed by  $\text{CaCO}_3$ . The molecular dynamics simulation was conducted to calculate the distribution of bridging oxygen and the mean square displacement (MSD) of oxygen atoms during the roasting process of the system with three different additives respectively, and the dephosphorization mechanism of  $\text{CaCO}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{CaF}_2$  during the direct reduction process of high-phosphorus hematite was explored. The results show that the mechanism of dephosphorization by additives is to inhibit reduction of apatite by increasing the content of free oxygen or the MSD of oxygen atoms in the system and reducing the oxygen atoms shared by Si and P in the system. It is found that the dephosphorization performance of additives is positively correlated with the MSD of oxygen atoms in the system.

**Key words:** molecular dynamics simulation; direct reduction; high-phosphorus hematite; dephosphorization; dephosphorizing agent; apatite; free oxygen; mean square displacement (MSD)

世界高磷铁矿储量丰富, 仅我国的储量就高达 74 亿吨。开发适用于高磷赤铁矿的选冶技术, 对于保证我国铁矿资源供给、促进我国钢铁工业长期稳定发展, 具有重大意义<sup>[1]</sup>。

根据高磷赤铁矿的复杂特性, 可以采用还原焙烧-磨矿-磁选的选冶联合工艺对其进行高效处理<sup>[1-5]</sup>。该工艺将高磷赤铁矿在一定还原气氛下焙烧, 所得焙烧

产物在合适的工艺条件下磨矿和磁选, 实现金属铁与脉石的分离<sup>[6]</sup>。该工艺的难点在于还原气氛下不仅赤铁矿会发生还原, 磷灰石也会部分还原产生单质磷, 还原出的单质磷很容易进入铁相<sup>[7-9]</sup>, 此时只通过磨矿-磁选的方法难以实现铁磷的分离, 不能得到指标良好的金属铁。

为了抑制磷灰石的还原, 研究人员在直接还原过

① 收稿日期: 2023-10-19

基金项目: 国家重点研发计划项目(2021YFC2902504)

作者简介: 钟志刚(1993—), 男, 江西赣州人, 硕士, 主要从事矿产资源综合利用研究工作。E-mail: 2413596863@qq.com

程中加入脱磷剂,  $\text{CaCO}_3$ 、 $\text{Na}_2\text{CO}_3$ 、 $\text{CaF}_2$  被证实能够在还原过程中起到脱磷作用<sup>[10-12]</sup>, 但这3种添加剂在高磷赤铁矿直接还原焙烧过程中脱磷性能差异未被详细对比, 且脱磷机制尚不清晰。本文以鄂西高磷鲕状赤铁矿为原料, 对比了3种添加剂的脱磷性能, 并利用分子动力学模拟手段从分子层面对3种添加剂的脱磷机理进行研究, 阐明了  $\text{CaCO}_3$ 、 $\text{Na}_2\text{CO}_3$ 、 $\text{CaF}_2$  脱磷性能不同的原因。

## 1 原料性质及试验方法

### 1.1 原料性质

鄂西鲕状铁矿是高磷赤铁矿石中较为典型的一类矿床, 具有分布广、规模大、储量丰富等特点。其化学多元素分析结果见表1。该矿石中铁含量达到了43.58%, 主要以赤铁矿形式赋存; 有害元素磷含量达到了0.94%。

表1 鄂西高磷赤铁矿化学多元素分析结果(质量分数) %

TFe	$\text{SiO}_2$	$\text{Al}_2\text{O}_3$	CaO	MgO	P
43.58	17.10	9.28	3.58	0.45	0.94

### 1.2 试验方法

为了考察不同添加剂对高磷鲕状赤铁矿直接还原铁指标的影响规律, 在还原温度  $1150\text{ }^\circ\text{C}$ 、烟煤用量20%、焙烧时间70 min条件下, 只改变添加剂种类和用量, 使用包埋法对高磷赤铁矿进行还原焙烧-磨矿-磁选, 获得直接还原铁精矿。试验流程见图1。

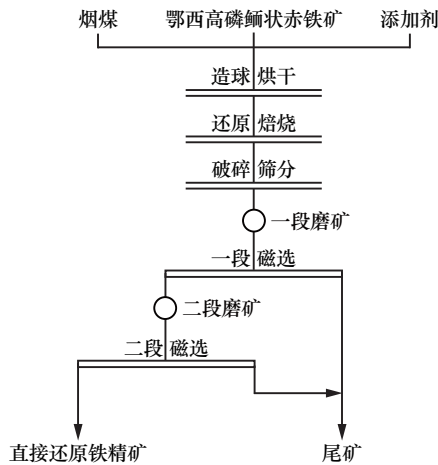


图1 试验流程

将制备好的球团放入石墨坩埚中用20%的烟煤包埋加盖保护, 待马弗炉炉膛温度升至  $1150\text{ }^\circ\text{C}$  时, 将坩埚放入马弗炉中焙烧70 min。达到焙烧时间后将坩埚取出, 在空气中自然冷却得到焙烧矿。将焙烧矿破碎至  $-2\text{ mm}$ , 缩分后用棒磨机进行一段磨矿, 磨矿细度

$-0.074\text{ mm}$  粒级占50%, 使用磁选管在磁场强度  $87.58\text{ kA/m}$  条件下进行一段磁选, 一段磁选精矿进行再磨再选; 二段磨矿细度  $-0.074\text{ mm}$  粒级占90%, 二段磁选磁场强度  $87.58\text{ kA/m}$ , 二段磁选精矿为最终产品直接还原铁。

采用化学分析法检测直接还原铁粉中铁品位及磷含量, 计算金属铁回收率, 对试验结果进行分析, 对比不同添加剂的脱磷性能。

## 2 试验结果与讨论

$\text{CaCO}_3$  用量对直接还原铁指标的影响如图2所示。由图2可以看出, 不添加  $\text{CaCO}_3$  时, 直接还原铁品位和铁回收率分别为92.84%和87.59%, 但磷含量达到0.47%; 随着  $\text{CaCO}_3$  用量增加, 直接还原铁品位逐渐下降, 但依然保持在较高水平, 铁回收率小幅上升, 磷含量先大幅下降后小幅下降, 说明  $\text{CaCO}_3$  能降低直接还原铁中磷含量。

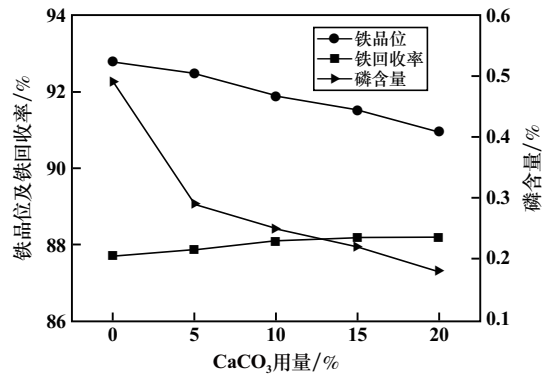


图2  $\text{CaCO}_3$  用量对直接还原铁指标的影响

$\text{Na}_2\text{CO}_3$  用量对直接还原铁指标的影响如图3所示。随着  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  用量增加, 直接还原铁品位逐渐提高, 磷含量大幅下降, 铁回收率小幅增加。  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  提铁降磷性能良好, 指标优于  $\text{CaCO}_3$ 。

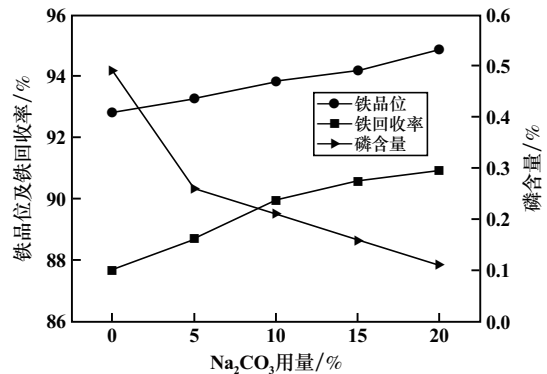


图3  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  用量对直接还原铁指标的影响

$\text{CaF}_2$  用量对直接还原铁指标的影响如图4所示。

CaF<sub>2</sub> 用量增加对直接还原铁品位和回收率的影响很小, CaF<sub>2</sub> 用量 20% 时直接还原铁中磷含量仍有 0.38%。可见 CaF<sub>2</sub> 具有一定的脱磷效果但不显著。

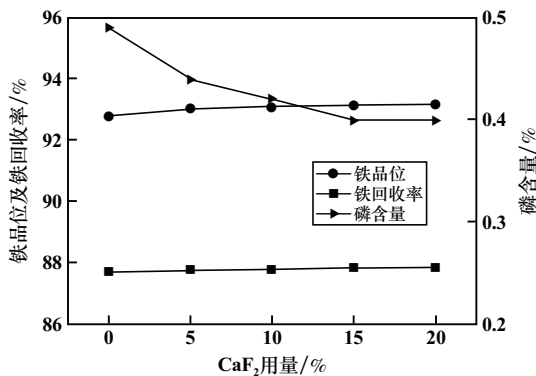


图4 CaF<sub>2</sub> 用量对直接还原铁指标的影响规律

从回收铁的角度看, CaCO<sub>3</sub> 和 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 都能提高铁回收率, 添加 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 还能提高直接还原铁的品位; 从脱磷性能分析, CaCO<sub>3</sub>、Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 和 CaF<sub>2</sub> 都具有脱磷效果, 其中 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 脱磷性能最好, CaCO<sub>3</sub> 次之。Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 在提高铁回收率和脱磷效果方面更具优势, 但 CaCO<sub>3</sub> 更廉价, 大量添加 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 会使成本过高。

### 3 分子动力学模拟研究

#### 3.1 分子动力学模拟条件设定

##### 3.1.1 势函数的选取

选择 Born-Mayer-Huggins (BMH) 势函数作为分子动力学模拟的力场。BMH 势函数形式如下:

$$V_{ij}(\bar{r}) = A_{ij} \exp\left(-\frac{\bar{r}_{ij}}{\rho_{ij}}\right) + \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 \bar{r}_{ij}} - \frac{C_{ij}}{\bar{r}_{ij}^6} \quad (1)$$

式中  $V_{ij}(r)$  为  $i$  原子和  $j$  原子之间的势能;  $\bar{r}_{ij}$  为  $i$  原子和  $j$  原子之间的直接距离, nm;  $\epsilon_0$  为真空电容率,  $\epsilon_0 = 8.85418 \times 10^{-12}$  F/m (近似值);  $q_i q_j$  为  $i$  原子和  $j$  原子有效电荷的乘积;  $A_{ij}$  为原子之间的库伦作用,  $g \cdot \text{nm}^2/\text{fs}^2$ ;  $\rho_{ij}$  为近程排斥作用, nm;  $C_{ij}$  为相互作用产生的范德华作用,  $g \cdot \text{nm}^8/\text{fs}^2$ ; 单位 fs 为飞秒,  $1 \text{ fs} = 1 \times 10^{-15} \text{ s}$ ;  $A_{ij}$ 、 $\rho_{ij}$ 、 $C_{ij}$  的数值可查找 BMH 势函数的参数集<sup>[13]</sup>获得。

##### 3.1.2 分子动力学模拟的初始模型

根据试验结果设置 4 个初始模型作为独立体系, 分别为不使用添加剂、添加 20% CaCO<sub>3</sub>、添加 20% Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 和添加 20% CaF<sub>2</sub>。由于 CaCO<sub>3</sub> 和 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 在高温下分解为 CaO 和 Na<sub>2</sub>O, 为了简化体系, 可以按照质量比将 20% 的 CaCO<sub>3</sub> 和 20% 的 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 换算为 11.2% 的 CaO 和 11.6% 的 Na<sub>2</sub>O 加入模拟系统中。

体系中赤铁矿密度约 5.2 g/cm<sup>3</sup>, 石英密度约

2.7 g/cm<sup>3</sup>, 氟磷灰石密度约 3.18 g/cm<sup>3</sup>, 因此可将体系密度确定为 5.0 g/cm<sup>3</sup>。为了保证分子动力学模拟结果具有代表性, 能够客观反映添加剂在直接还原过程中的作用情况, 同时保证原子数量为整数, 设置不使用添加剂的初始模型总原子数量为 3 000, 其他初始模型在该模型基础上加入添加剂, 已知体系中全原子的相对分子质量和体系密度, 可计算体系中盒子的边长。各初始构型的原子种类、个数及盒子边长如表 2 所示。

表 2 体系原子种类、个数及盒子边长

添加剂种类	原子个数								盒子边长/nm
	Fe	O	P	Ca	Si	F	Na	总计	
无	888	1 826	39	64	170	13	0	3 000	6.628 4
20% CaCO <sub>3</sub>	888	1 998	39	236	170	13	0	3 344	7.043 7
20% Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	888	1 990	39	64	170	13	328	3 492	7.043 7
20% CaF <sub>2</sub>	888	1 826	39	289	170	463	0	3 675	7.043 7

#### 3.1.3 分子动力学模拟方法与步骤

还原焙烧过程中, 球团温度达到预设温度后, 体系温度不变, 过程中原子总数也不变, 因此选择分子动力学模拟在 NVT 系统下进行, 即保证体系原子数量  $n$ 、体积  $v$  和温度  $t$  保持不变。平衡计算精度和效率将短程力的截止半径设为 1 nm, 选择周期性边界条件。

通过大量的探索性模拟, 确定了一个稳定的计算过程, 并将其应用于每个样本。首先将初始温度设为 5 000 K, 运行 24 000 个时间步长, 这一步的目的是模拟高温地质成矿作用, 消除建模过程中人为原因对原子初始分布的影响, 优化体系中原子的初始位置。然后, 用 96 000 个时间步长将温度冷却到 1 423 K。系统在 1 423 K 弛豫 60 000 个时间步长, 温度、体积和焓都保持不变时, 表明系统达到了平衡状态。

### 3.2 分子动力学模拟结果与讨论

#### 3.2.1 桥氧分布

本文研究的 4 个体系中包含了 Si 和 P 氧化物, 根据已有文献资料, 可以按照 O<sup>2-</sup> 两端所连接的离子不同, 将 O<sup>2-</sup> 划分为桥氧、非桥氧以及自由氧。本文主要涉及的非桥氧结构为 Si—O—Ca、P—O—Ca; 自由氧两端连接的都是碱性阳离子。4 个体系达到平衡态后各类氧含量比例如表 3 所示。从表 3 可以看出, 未使用添加剂的体系和添加 20% CaF<sub>2</sub> 的体系自由氧含量较低、桥氧含量较高, 说明未使用添加剂的体系和添加 20% CaF<sub>2</sub> 的体系中聚合体结构的聚合度更高; 添加 20% CaCO<sub>3</sub> 和 20% Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 的体系聚合体结构更松散; 添加 20% Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 体系的桥氧含量最低, 说明添加 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 后体系结构松散简单, 有利于扩散。

表3 不同体系各类氧含量对比

添加剂种类	各类氧含量/%		
	桥氧	非桥氧	自由氧
无	27.10	69.10	3.80
20%CaCO <sub>3</sub>	13.97	74.11	11.92
20%Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	10.14	73.12	16.74
20%CaF <sub>2</sub>	24.05	72.12	3.83

为了进一步探究添加剂对体系结构及桥氧分布的影响规律,针对体系中存在的 Si—O—P、Ca—O—P 和 Si—O—Si 型氧进行统计,结果如图 5 所示。根据已有热力学研究了解到,没有石英参与,氟磷灰石无法在 1 423 K 发生还原,而石英的参与能够促进氟磷灰石的还原,此时体系中会出现 Si—O—P 型氧。

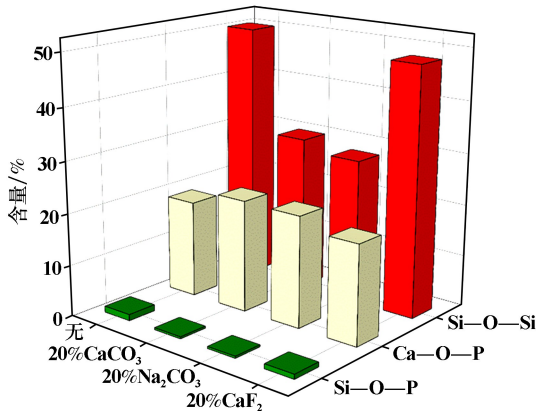


图5 不同体系部分 T—O—T 型氧的含量

模拟开始前体系中不含 Si—O—P 型氧,模拟结束后体系中 Si—O—P 型氧含量越高,磷灰石的还原越充分;体系中 Ca—O—P 型氧存在于磷灰石中,模拟开始后不会生成新的 Ca—O—P 型氧,因此 Ca—O—P 含量能够描述体系中氟磷灰石的稳定性,Ca—O—P 含量越高,说明体系中氟磷灰石越稳定。Si—O—Si 型氧含量能够反映体系中 Si<sup>4+</sup> 网络结构的复杂程度, Si—O—Si 型氧含量越高,体系中网格结构越复杂,体系中各种粒子的扩散受复杂网格的影响越严重。

从图 5 可以看出,添加 20%CaCO<sub>3</sub> 和 20%Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 的体系中 Si—O—P 型氧和 Si—O—Si 型氧含量明显低于未使用添加剂和添加 20%CaF<sub>2</sub> 的体系,这是因为未使用添加剂和添加 20%CaF<sub>2</sub> 的体系中自由氧含量低,为了形成稳定的四面体结构, Si 和 P 相互争夺氧原子,当两个不同的 Si 原子共用顶角的 O 原子时产生了 Si—O—Si 型氧,当 Si 原子和 P 原子共用 O 原子时出现了 Si—O—P 型氧。如图 6 所示。

CaCO<sub>3</sub> 和 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 分解后的组分为 CaO 和 Na<sub>2</sub>O, 它们为体系提供了自由氧,自由氧含量增加后 Si、P 无

需再共用 O 原子, Si—O—Si 型氧与 Si—O—P 型氧含量降低,体系中不产生 Si—O—P 型氧,磷灰石的还原被抑制。

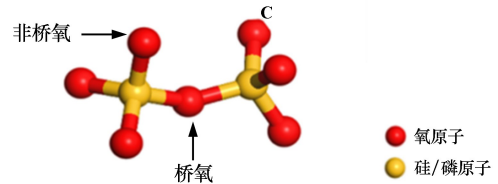


图6 硅氧或磷氧四面体结构示意图

从图 5 还可以看出,添加 CaCO<sub>3</sub> 和 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 的体系中 Ca—O—P 型氧含量更高,而体系中 Ca—O—P 型氧只存在于氟磷灰石中,这说明添加 CaCO<sub>3</sub> 和 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 后氟磷灰石在体系中的稳定性提高了,不利于磷的还原。

### 3.2.2 氧原子均方位移

虽然桥氧分布的研究已经解释了 CaCO<sub>3</sub> 和 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 脱磷性能优于 CaF<sub>2</sub> 的原因,但还不能解释 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 脱磷性能优于 CaCO<sub>3</sub> 的原因。相同质量的 CaCO<sub>3</sub> 分解后产生的自由氧数量多于 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>,但脱磷性能却次于 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>。

如前所述,添加 CaCO<sub>3</sub> 的体系中 Si—O—Si 型氧含量要明显多于添加 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 的体系,而 Si—O—Si 型氧越多,体系中原子迁移越困难。均方位移能够直观反映某个粒子在体系网格结构中的活跃程度,氧原子的均方位移 MSD 计算公式为:

$$MSD = \langle \Delta \vec{r}(t)^2 \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum |r_i(t) - r_i(0)| \right\rangle \quad (2)$$

式中  $r_i(t)$  为  $i$  原子在  $t$  时刻的位置;  $\langle \rangle$  是对组内所有原子进行平均的运算。

体系中氧原子的均方位移如图 7 所示。从图 7 可以看出,相同时间下,添加 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 体系中氧原子均方位移最大,这与前文中添加 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 后体系结构松散简单、利于扩散的结论一致,这是由于 Na<sup>+</sup> 具有更小的离子半径,能够较好地解聚体系中的复杂网格结构,网格边缘的 Na<sup>+</sup> 起到润滑的作用,加快自由氧的扩散,使得自由氧能充分扩散到体系中。因此,虽然添加 20%Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 的体系自由氧数量少于添加 20%CaCO<sub>3</sub> 的体系,但自由氧在 Na<sup>+</sup> 的润滑作用下能快速扩散到体系中,与 [SiO<sub>4</sub>] 和 [PO<sub>4</sub>] 四面体结合,达到抑制氟磷灰石还原的目的。CaF<sub>2</sub> 具有一定脱磷效果的原因是体系中 Ca<sup>2+</sup> 数量增多,解聚了部分网格结构,加速了体系中自由氧的扩散。

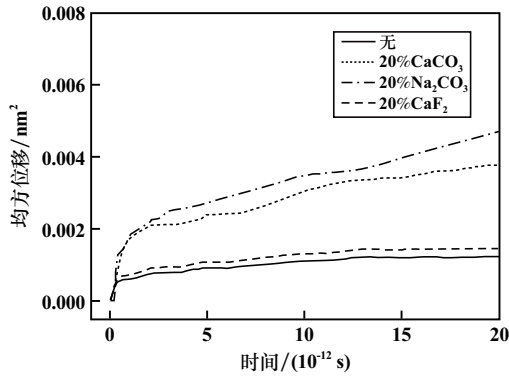


图7 各体系中氧原子均方位移

## 4 结 论

1)  $\text{CaCO}_3$ 、 $\text{Na}_2\text{CO}_3$  和  $\text{CaF}_2$  都具有脱磷效果,其中  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  脱磷性能最好, $\text{CaCO}_3$  次之,且  $\text{CaCO}_3$  和  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  在脱磷的同时能提高铁回收率。

2) 添加剂脱磷的作用机制是提高体系中自由氧含量或者提高体系中氧原子的均方位移、减少体系中 Si、P 共用氧原子,从而抑制磷灰石的还原。 $\text{Na}_2\text{CO}_3$ 、 $\text{CaCO}_3$  分解后的有效组分为  $\text{Na}_2\text{O}$ 、 $\text{CaO}$ , 这两者能为焙烧体系提供金属阳离子和自由氧,但  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  中的  $\text{Na}^+$  能解聚复杂的网格体系,提高体系中自由氧的均方位移,其脱磷效果优于  $\text{CaCO}_3$ 。 $\text{CaF}_2$  只能增加体系中金属阳离子,脱磷效果不明显。

3) 添加剂脱磷性能与体系中氧原子均方位移呈正相关,提高体系中氧原子的均方位移有利于抑制磷灰石的还原。

### 参考文献:

[1] 张媛媛. 直接还原高磷铁矿磷分离工艺基础研究[D]. 北京:北京科技大学, 2019.

(上接第82页)

- [6] 郑诗礼,张洋,张盈,等. 一种废旧磷酸铁锂材料的回收方法及得到的回收液:112310499B[P]. 2019-07-31.
- [7] 陈迎迎. 一种从废旧磷酸铁锂电池正极粉中回收制备电池级碳酸锂和磷酸铁的方法:113912032A[P]. 2022-01-11.
- [8] 程光生,李安国,刘雅婷,等. 废旧磷酸铁锂正极粉料的回收利用方法:112811404B[P]. 2021-05-18.
- [9] 王成彦,张家靓,马林林,等. 高杂磷酸铁锂正极废料回收制备碳酸锂和磷酸铁的方法:114655969A[P]. 2022-06-24.
- [10] 林永寿,王国宝,王珂,等. 一种以退役磷酸铁锂电池为原料生

- [2] 朱德庆,李静华,杜永强,等. 强化鲕状赤铁矿还原磁选脱磷机理研究[J]. 矿冶工程, 2014,34(5):74-77.
- [3] 艾光华,李晓波,周源. 高磷铁矿石脱磷技术研究现状及发展趋势[J]. 有色金属科学与工程, 2011,2(4):53-58.
- [4] 周文涛,韩跃新,孙永升,等. 高磷鲕状赤铁矿提铁降磷研究综述[J]. 金属矿山, 2019(2):10-14.
- [5] CAO Yunye, ZHANG Yiran, SUN Tichang. Dephosphorization behavior of high-phosphorus oolitic hematite-solid waste containing carbon briquettes during the process of direct reduction-magnetic separation[J]. Metals (Basel), 2018,8(11):897.
- [6] 吴世超,孙体昌,李正要,等. 高磷铁矿石直接还原-磁选研究进展[J]. 金属矿山, 2021(2):58-64.
- [7] 李国峰,高鹏,韩跃新,等. 高磷鲕状赤铁矿深度还原过程中磷的迁移行为[J]. 金属矿山, 2017(2):43-47.
- [8] 李永利,孙体昌,徐承焱,等. 高磷鲕状赤铁矿直接还原同步脱磷新脱磷剂[J]. 中南大学学报(自然科学版), 2012,43(3):827-834.
- [9] 吴宝国,王海川,周云,等. 降低钙系脱磷剂中氟含量的可行性研究[J]. 钢铁钒钛, 2003(2):7-10.
- [10] 吴世超,孙体昌,杨慧芬. 国外某高磷鲕状赤铁矿直接还原-磁选降磷研究[J]. 金属矿山, 2019(11):109-114.
- [11] WU Shi-chao, LI Zheng-yao, SUN Ti-chang, et al. Effect of additives on iron recovery and dephosphorization by reduction roasting-magnetic separation of refractory high-phosphorus iron ore[J]. International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials, 2021,28(12):1908-1916.
- [12] Alfonso Pedone, Malavasi Gianluca, Menziani M-Cristina, et al. A New Self-Consistent Empirical Interatomic Potential Model for Oxides, Silicates, and Silica-Based Glasses[J]. The Journal of Physical Chemistry B, 2006,110(24):11780-11795.
- [13] Shanzhong-Shawn Duan, Ries Andrew. An efficient algorithm for equations of motion of molecular dynamical systems[J]. Mathematical and Computer Modelling, 2012,55(3-4):1516-1528.

引用本文:钟志刚,李宗蔚,杨备,等. 高磷赤铁矿直接还原过程中不同添加剂脱磷的性能对比及分子动力学模拟研究[J]. 矿冶工程, 2024,44(2):83-87.

产磷酸铁锂前驱体的方法:112955404B[P]. 2022-06-03.

- [11] 郭永欣,黎俊茂. 重铬酸钾容量法测定电池用磷酸铁中铁含量[J]. 广州化工, 2014,42(11):140-141.
- [12] 吴颖超,杜进桥,田杰,等. 废旧磷酸铁锂正极材料的硫酸熟化-水浸工艺研究[J]. 矿冶工程, 2021,41(5):116-120.

引用本文:刘晓峰,黄自力,肖骁,等. 废旧电池回收过程中磷酸铁渣的提纯[J]. 矿冶工程, 2024,44(2):78-82.