

高纯铝灰溶出行为与物相转化规律研究

贺永东¹ 金春容¹ 孙郅程¹ 孙小涵³ 赵亿坤¹ 努力古·伊明²

(1.新疆大学物理科学与技术学院; 2.新疆众和股份有限公司; 3.武汉大学法学院)

摘 要 采用 XRF、SEM、XRD 等分析方法研究了盐酸溶出高纯铝灰物相转化规律。结果表明,高纯铝灰主要由长条状、柱状、棒状、球状颗粒组成,物相为 Al、Al₂O₃、Al₂OC、BaO 等,盐酸浸渣物相为 AlN、Al₂O₃、Al(OH)₃。在盐酸中,溶出率随液固比增大和温度升高而增大,在 65 ℃时达最大值。酸浸时,含 Al 物相转化为[AlCl₃(H₂O)₆]。聚铝形成时,结构由四面体、八面体向高聚体转化。由羟基形成六元环稳定结构,单聚体以一个顶点 H 与六元环上羟基聚合,形成外挂式多维网状结构。

关键词 高纯铝灰;溶出行为;物相转化

中图分类号 TG146.21 **文献标志码** A

DOI:10.15980/j.tzzz.2021.10.004

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



Leaching Behavior and Phase Transformation Law of High Pure Aluminum Ash

He Yongdong¹, Jin Chunrong¹, Sun Zhicheng¹, Sun Xiaohan³, Zhao Yikun¹, Nuligu · Yimin²

(1.School of Physicals and Technology, Xinjiang University;

2.Xinjiang Join World Co., Ltd.; 3.School of Law, Wuhan University)

Abstract: The phase transformation law of hydrochloric acid dissolved high pure aluminum ash were investigated by XRF, SEM, XRD and other analytical methods. The results indicate that the high-purity aluminum ash is composed of long strip, columnar, rodlike and spherical particles with phases composed of Al, Al₂O₃, Al₂OC and BaO etc., and acid-leached residue phases are AlN, Al₂O₃ and Al(OH)₃. In hydrochloric acid, the dissolution rate is increased with the increase of liquid-solid ratio and temperature, which reaches the maximum value at 65 ℃. The phase containing Al is transformed into [AlCl₃(H₂O)₆] during acid leaching. The structure of formed polymeric aluminum is transformed from tetrahedron and octahedron to polymers, where a stable six-membered ring structure is formed by hydroxyl group, and the monomer is polymerized with hydroxyl group on the six-membered ring at a vertex H to form a plug-in multi-dimensional network structure.

Key Words: High Pure Al Ash, Dissolution Behavior, Phase Transformation

高纯铝在航空航天、电子信息、交通、化工等众多领域得到广泛应用^[1,2]。高纯铝熔铸会产生大量危险固体废弃物。以新疆众和公司为例,每年产生高纯铝灰渣 4 000~6 000 t^[3]。高纯铝灰渣含有一定的铝、铝化物以及氟盐、氯盐、钡盐等有害物,由于 Si、Fe、Cu、Zn、C 等杂质含量极低,其回收的经济性高于普通铝灰^[4,5]。

贺永东等^[6]、周扬名等^[7]发现,二次铝灰由 Al、Al₂O₃、AlN、MgAl₂O₄ 以及 Al₄C₃ 和 Na₃AlF₆ 等物相组成。李玲玲等^[8]、YOLDI M^[9]探讨了固液比、碱浓度、温度和时间等因素对氧化铝溶出率的影响。吕帅帅等^[10]研究了氮化铝在焙烧、水解过程中的转化行为。郭学益等^[11]研究了碱灰质量比、盐灰质量比、温度、时

间等因素对铝浸出率的影响,得出优化的低温焙烧-浸出工艺。张宁燕^[12]采用碱熔法脱除二次铝灰中的 F、Cl 元素,并通过去离子水浸出焙烧产物中的铝酸钠。戴翔等^[13]研究发现,二次铝灰具有明显的反应性和浸出毒性,浸出氨释放率为 10~20 mg/kg,氟浸出浓度为 181~1 910 mg/L。鲍善词等^[14]研究了浸出时间、液固比、pH 值、温度对铝灰氟氯浸出率的影响。杜凯峰等^[15]利用普铝灰酸溶法制备聚合氯化铝(PAC),获得了最佳工艺参数。高纯铝灰中 As、Pb、Hg、Cd 含量极低,可以用作高端化工聚合氯化铝原料。高纯铝灰酸浸浸出率是影响聚铝产量、质量和综合效益的决定因素。迄今为止,有关高纯铝灰成分、物理化学特性与高值化

收稿日期:2020-11-09;修改稿收到日期:2021-07-20
基金项目:国家自然科学基金资助项目(51661031,51861033);新疆维吾尔自治区科技厅重点研发计划资助项目(202008819)
第一作者简介:贺永东,男,1965 年出生,教授,乌鲁木齐(830046),E-mail:hydong@126.com
通信作者:金春容,女,1996 年出生,硕士研究生,乌鲁木齐(830046),E-mail:chunrongjin@163.com
引用格式:贺永东,金春容,孙郅程,等. 高纯铝灰溶出行为与物相转化规律研究[J]. 特种铸造及有色合金, 2021, 41(10): 1 204-1 209.
HEY D, JIN C R, SUN Z C, et al. Leaching behavior and phase transformation law of high pure aluminum ash[J]. Special Casting & Non-ferrous Alloys, 2021, 41(10): 1 204-1 209.

资源利用等相关领域,国内外尚无相关的研究报道。本课题以新疆某公司高纯铝灰为原料,采用 XRF、SEM、XRD 等检测分析方法研究高纯铝灰渣及其盐酸溶出过程中,化学成分、溶出行为、物相组成与溶出过程物相转化规律,为高纯铝灰高值化综合利用,提供参考。

1 试验方法

1.1 试验步骤

以新疆某公司粒径为 300~425 μm 的高纯铝灰(其成分见表 1)、35%的盐酸为原料,在固液比为 1:10、温度为 25℃条件下,采用去离子水对铝灰进行脱钡;在固液比为 1:40~1:10,酸液比为 1:5~1:1,浸出时间为 1~6 h(含浸出和熟化两个过程),浸出温度为 25~85℃(浸出温度和熟化温度相同)条件下,在四口烧瓶水浴酸性浸出;清洗浸出渣,用 TG20G 型离心机进行渣液分离;用 101-3A 型电热恒温干燥箱于 180℃×2 h 对浸出渣、聚合氯化铝溶液进行干燥;用电子天平对高纯铝灰、酸浸浸出-水洗-离心脱水-干燥渣计量称重;采用 XRF、红外吸收法、熔融电导法、电感耦合等离子体原子发射光谱、SEM(S4800)、EDS、XRD(D8 Advance)分析高纯铝灰和酸浸干燥渣化学成分、物相组成和微区化学成分。

表 1 高纯铝灰的化学成分

Tab.1 Chemical composition of high pure aluminum ash %										
wB										
O	F	Cl	Si	Fe	Mg	Na	K	C	N	Al
39.15	0.20	0.80	0.21	0.099	1.82	0.05	0.029	0.061	0.028	余量

注:按照 GB/T5085.3-2007 测定,Pb 含量≤0.20 mg/L;Hg 含量≤0.05 mg/L;As 含量≤0.01 mg/L;Cd 含量≤0.01 mg/L

1.2 高纯铝灰浸出计算

根据电子天平测定高纯铝灰及酸液浸出-水洗-脱水-干燥渣质量数据,高纯铝灰酸浸溶出率(Al、Al₂O₃、AlN、Al₄C₃等溶出)计算如下:

$$X = \frac{M_1 - M_2}{M_1} \times 100\%$$
 (1)

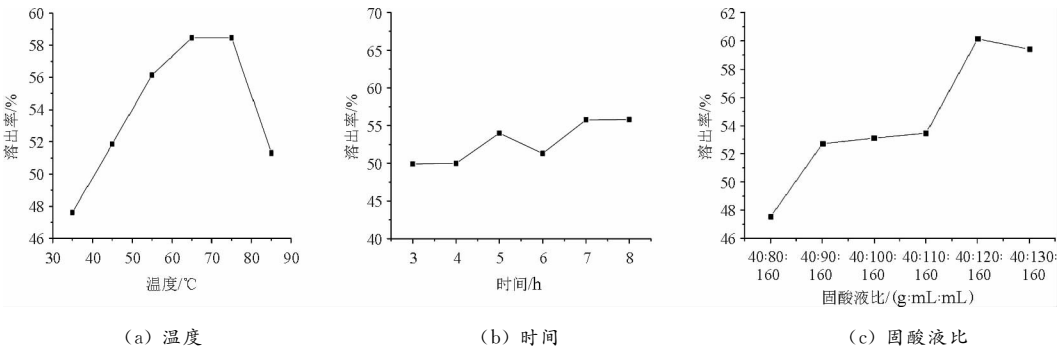


图 2 浸出工艺对高纯铝灰酸浸溶出率影响

Fig.2 Effect of leaching process on hydrochloric acid leaching rate of high pure Al ash

式中,X 为高纯铝酸溶出率,%;M₁ 为高纯铝灰质量,g;M₂ 为酸浸浸出-水洗-离心脱水-干燥渣质量,g。

2 试验结果与讨论

2.1 原始高纯铝灰 XRD 分析

图 1 为原始铝灰 X 射线衍射分析(XRD)结果。结合表 1 可以看出,铝灰中主要元素包括 Al、O、Mg、F、Cl、Na、K、Si、Fe、N 等,试验铝灰的物相组成包括 Al、Al₂O₃、MgAl₂O₄、AlN、Al₂OC、BaO 等。铝灰中 Si 来源于 Al-Si、Al-Mg-Si 系合金组元;F、Cl、Na、K 来源于电解液和精炼剂;Fe 来源于操作工具带入;配制含镁铝合金时,Mg、Al 与大气中 O₂ 反应生成 MgAl₂O₄;Al₂O₃ 是高纯 Al 在熔炼过程中发生氧化的产物;AlN 来源于高纯铝与大气、精炼介质高纯氮反应产物;Al₂OC 为三层液电解时阴极铝液与阴极石墨在大气气氛下反应的产物;BaO 为电解质组分 BaCl₂ 的水解产物 Ba(OH)₂ 受热分解导致的。

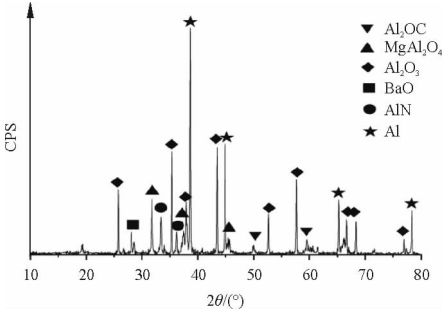


图 1 高纯铝灰 XRD 分析

Fig.1 XRD analysis of high pure aluminium ash

2.2 原始高纯铝灰盐酸浸出过程

经过脱钡后的铝灰,在固酸比为 1:2~1:3.25,酸液比为 1:1~1:2,浸出时间为 1~6 h,浸出温度为 25~85℃条件下,进行酸性浸出;温度、时间、酸固比对酸浸溶出率影响见图 2。固液比为 1:10,在 25、35、45、55、65、75 和 85℃下,高纯铝灰在盐酸溶液中浸出 6 h,随后离心脱滤,滤渣在恒温干燥箱中烘干,测定计

算铝灰酸溶出率,见图 2a。随温度从 35 ℃ 升高到 65 ℃,铝灰中金属铝、氯化铝等与盐酸反应速度加快,酸液挥发速度同步加快,但升温对浸出速率的影响大于酸液挥发对浸出速率的影响,铝灰溶出率增加;当温度达到 65 ℃ 时,升温对浸出速率的影响与酸液挥发对溶出速率的影响达到动态平衡,溶出率达到最大值;温度超过 75 ℃ 时,酸液挥发对浸出速率的影响大于升温对溶出速率的影响,铝灰溶出率迅速降低。

固、液(酸+水总量)比为 1∶10,在 85 ℃ 下,浸出时间为 3、4、5、6、7、8、9 h 条件下铝灰酸浸溶出率见图 2b。可以看出,在反应温度一定条件下,盐酸与金属铝、氯化铝等反应的活化能很大,一定时间后,反应即达到动态平衡,随反应时间延长,铝灰溶出率略微增加。

浸出时间为 6 h,浸出温度为 85 ℃ 时,不同固酸液比对铝灰酸浸溶出率的影响(见图 2c)。可见随酸固比

和液固比增大,铝灰渣溶出率逐渐增大。固酸比为 1∶3 时,溶出率达到最大值,此后,随固酸比增加,溶出率开始降低。铝灰酸溶时,铝溶出、水解和熟化过程同时发生,反应前期,溶出产物为 AlCl₃。反应中期,AlCl₃ 开始水解,水解产物为 Al(OH)₃ 和 HCl,水解降低了 AlCl₃ 浓度并增加溶液酸度,促进酸溶反应向右进行,使铝灰溶出率增加。当溶液中 Al(OH)₃ 达到一定限度时,过量的 Al(OH)₃ 和盐酸抑制水解过程,进而抑制铝灰酸溶过程。过量的 Al(OH)₃ 附着在铝灰颗粒表面,阻断氧化铝与盐酸接触,铝灰溶出率降低。

2.3 原始高纯铝灰渣 SEM-EDS 分析

采用 SEM、EDS 观察高纯铝灰形貌,分析典型颗粒成分,显微形貌显示铝灰由大小、形貌不一的颗粒组成,见图 3,典型颗粒元素含量见表 2。

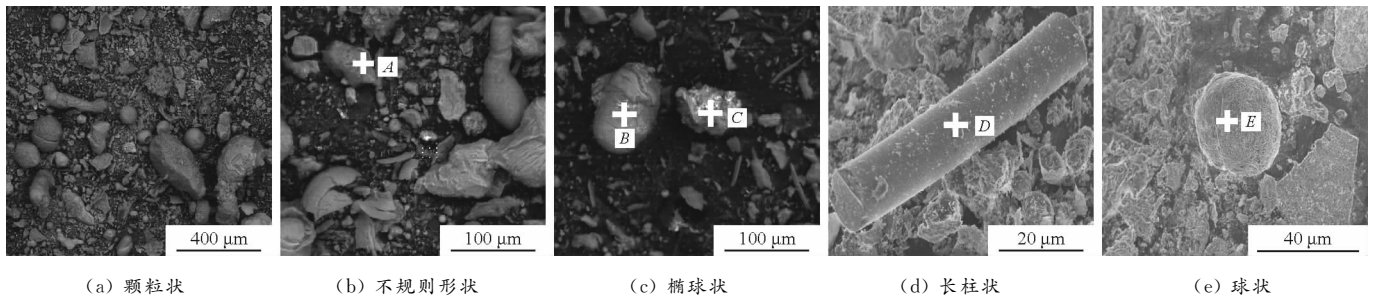


图 3 高纯铝灰的 SEM 形貌

Fig.3 SEM images of high pure Al ash

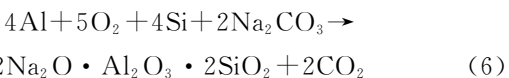
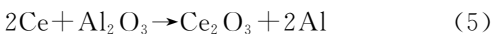
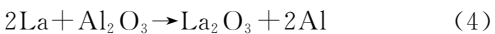
表 2 图 3 中高纯铝灰试样微区 EDS 分析结果

Tab.2 EDS analysis of micro-area in high pure aluminum ash slag in Fig.3

区域	x _B													%
	Al	O	C	Na	K	Cl	Zr	Na	Ce	La	Si	Ca	Mg	
A	56.36	43.64	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
B	32.67	54.35	10.01	—	0.22	0.97	1.81	0.72	—	—	—	0.15	14.95	
C	39.84	41.27	—	—	—	4.25	—	—	1.02	1.63	—	—	11.99	
D	4.22	52.14	10.41	7.41	—	—	—	—	—	—	20.63	3.50	1.68	
E	47.55	50.07	—	—	—	—	0.89	—	—	—	—	—	1.49	

由图 3 和表 2 可见,高纯铝灰主要由颗粒状物质组成,A 处为 Al、Al₂O₃ 形成的混合物,B 处为椭球状颗粒,为 Al、Al₂O₃、Al₃Zr、C、KCl、NaCl、MgAl₂O₄、2CaO·Al₂O₃ 形成的混合物,C 为石墨阴极剥落物,KCl、NaCl 为精炼剂组分,Al₃Zr 为铝液细化剂组分,MgAl₂O₄ 为合金组元 Mg 与 Al 氧化造渣形成的铝酸盐,2CaO·Al₂O₃ 为三层液电解质组分和铝氧化形成的铝酸盐;C 处为 Al、Al₂O₃、MgAl₂O₄、MgCl₂、La₂O₃、Ce₂O₃ 的复合物,MgCl₂ 为三层液电解质组分造渣,La₂O₃、Ce₂O₃ 为复合稀土变质剂氧化造渣产物;D 处长柱状颗粒为 Al、Al₂O₃、C、MgAl₂O₄、Na₂O·Al₂O₃·2SiO₂、2CaO·Al₂O₃ 的复合物,Na₂O·Al₂O₃·2SiO₂

为合金组元 Al、Si 氧化并与精炼剂组分 Na₂CO₃ 反应产物;E 处球状颗粒为 Al、Al₂O₃、Al₃Zr 形成的混合物。相关化学反应如下:



2.4 高纯铝灰酸溶法聚合氯化铝与溶渣 XRD 分析

图 4 为高纯铝灰盐酸酸溶制备聚合氯化铝及其酸溶残渣 X 射线衍射分析结果(固液比为 1∶10,浸出温度为 85 ℃,反应时间为 6 h)。图 4a 为酸溶法制备聚合氯化铝,经恒温干燥箱干燥所得固体 XRD 分析结果,高纯铝灰酸溶—熟化产物为聚合氯化铝,不同烘干温度和不同脱水时间,能得到不同配位水和不同结构水含量的聚铝水合物,包括[Al(H₂O)Cl₃],[Al(H₂O)₆Cl₃],[Al₅(OH)₁₂(H₂O)₇Cl₃],[Al₅(OH)₁₂(H₂O)₄Cl₃],[Al₁₀(OH)₂₆(H₂O)₁₆Cl₄]等聚合度不同、部分脱水的产物;图 4b 为铝灰酸溶残渣 XRD 分析结果,可见残渣

由 AlN、Al₂O₃、Al(OH)₃ 等物相组成。

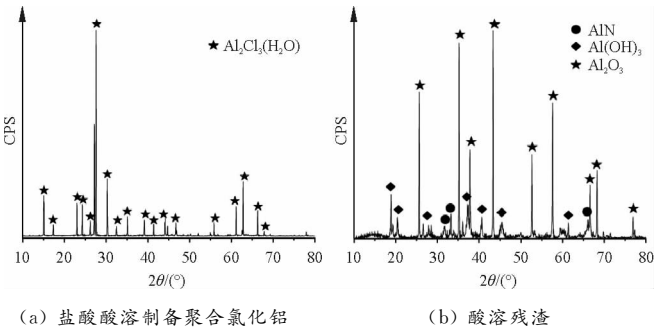


图 4 高纯铝灰盐酸酸溶制备聚合氯化铝及其酸溶残渣 XRD 分析

Fig.4 Preparation of polymeric AlCl₃ by hydrochloric acid and XRD analysis of acid-leached residue

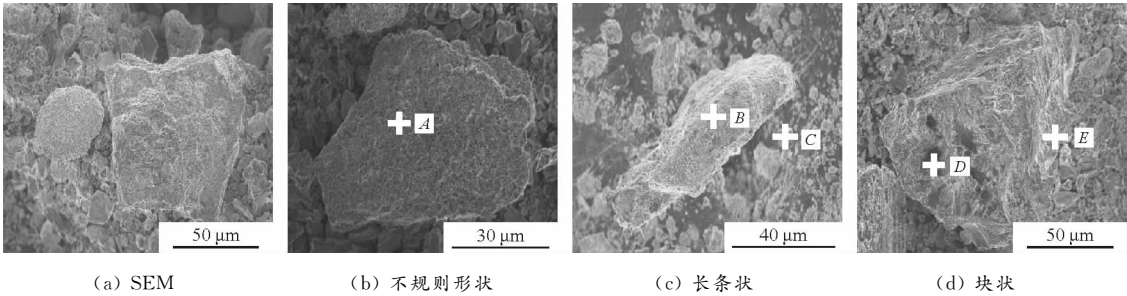


图 5 高纯铝灰酸浸渣 SEM 形貌

Fig.5 SEM photographs of acid-leached residue from high pure Al ash

表 3 图 5 中高纯铝灰酸浸渣试样 EDS 分析结果

区域	x _B														%
	Al	O	C	K	Cl	Fe	Zr	N	Na	F	Ti	Si	Ca	Mg	
A	45.45	41.13	4.26	1.05	2.28	—	—	—	—	2.19	0.15	0.21	0.24	2.25	
B	18.21	58.80	0.60	0.29	—	0.40	—	—	0.23	—	0.30	20.98	0.19	14.95	
C	64.67	25.10	5.48	0.48	1.08	0.43	1.16	—	—	—	0.27	—	—	0.68	
D	63.42	27.75	4.03	0.39	0.83	—	—	—	0.66	—	0.19	—	—	0.73	
E	44.38	39.02	2.19	0.29	0.45	—	—	11.63	0.27	1.17	—	—	—	0.60	

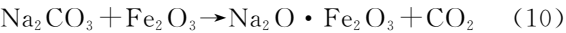
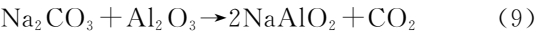
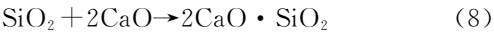
时,Ti、Al 形成的四方结构的初生 Al₃Ti,静置时 Al₃Ti 会发生聚集、长大、失配并形成初生相。B 处长条状颗粒为 Al、Al₂O₃、C、KAlO₂、NaFeO₂、Al₃Ti、MgAl₂O₄、Na₂O·Al₂O₃、2SiO₂、2CaO·SiO₂形成的混合物,其中 MgAl₂O₄为 Mg 与 Al 氧化造渣时形成的铝酸盐,2CaO·SiO₂为三层液电解质组分和铝氧化形成的原硅酸钙。C 处颗粒为 Al、Al₂O₃、KCl、MgCl₂、Na₂O·Fe₂O₃、MgAl₂O₄、Al₃(Ti_{0.19}Zr_{0.82})形成的复合物。Al₃Zr 和 Al₃Ti 一样,均为铝液凝固时的异质晶核。D 处颗粒为 Al、Al₂O₃、C、KCl、MgCl₂、MgAl₂O₄、NaAlO₂、Al₃Ti 形成的复合物;E 处颗粒为 Al、Al₂O₃、AlN、AlF₃、C、KCl、NaCl、MgAl₂O₄形成的混合物,AlN 为合金组元铝与精炼介质高纯氮反应的产物。上述酸浸渣中存在可溶的 KCl、NaCl、CaCl₂与 NaAlO₂,原因在于酸渣洗涤时固液比偏低,渣中可溶盐未能彻底溶出,Al₂O₃、MgAl₂O₄、2CaO·SiO₂等难溶渣形成微细包裹体,阻止

2.5 铝灰酸溶渣与聚合氯化铝 SEM-EDS 分析

高纯铝灰经去离子水脱 Ba,在固液比为 1 : 10、酸液比为 1 : 1、浸出时间为 6 h,在 85 ℃条件下的高纯铝灰酸溶残渣形貌见图 5,典型颗粒元素含量见表 3。

由图 5 可见,残渣由大小不一、形貌不规则的块状颗粒组成;A 处不规则形状块体颗粒为 Al、Al₂O₃、AlF₃、KCl、CaCl₂、C、MgAl₂O₄、Na₂O·Al₂O₃·2SiO₂、Na₂O·Fe₂O₃、Al₃Ti 等形成的混合物,其中 Na₂O·Al₂O₃·2SiO₂为 4xxx 合金熔炼时合金组元 Al、Si 与精炼剂组分钠盐反应形成的不溶于水的复盐,Na₂O·Fe₂O₃为氧化铁与精炼剂中钠盐(如碳酸钠)组分反应形成的难溶铁酸盐,Al₃Ti 为 Al-Ti-B 细化处理

可溶盐和金属铝溶出,离心干燥后,包裹体粉化,Al、KCl、NaCl、CaCl₂与 NaAlO₂等露出表面。酸浸渣主要包括 α-Al₂O₃、AlN、Al₃Ti、Al₃(Ti_{0.19}Zr_{0.82})、Na₂O·Al₂O₃·2SiO₂、2CaO·SiO₂、Na₂O·Fe₂O₃等沉淀相。相关化学反应如下:



在固液比为 1 : 10、酸液比为 1 : 1、浸出时间为 6 h,浸出温度为 85 ℃条件下酸浸得到琥珀色聚合氯化铝,pH 值为 0.73,聚铝为白灰色粉末团聚体,由大小、形貌不一的多面体团状结构组成,见图 6,典型颗粒元素含量见表 4。

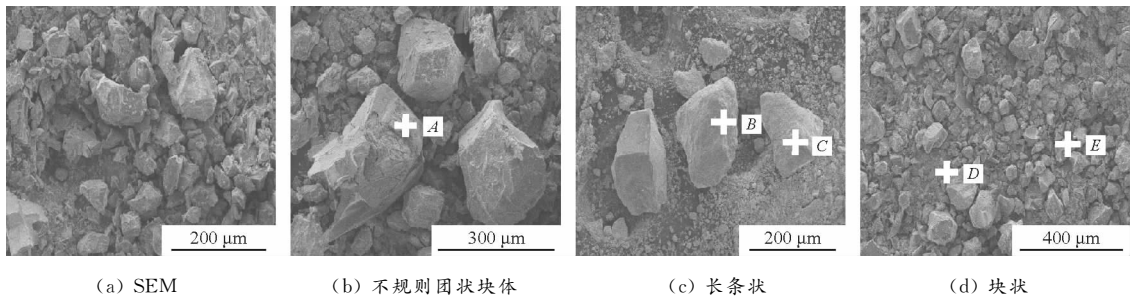


图 6 高纯铝灰酸浸聚合氯化铝 SEM 形貌

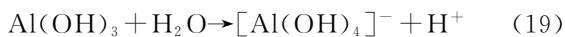
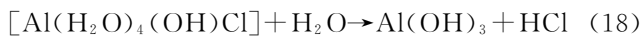
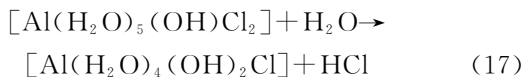
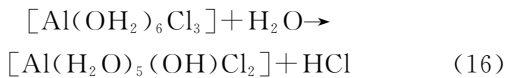
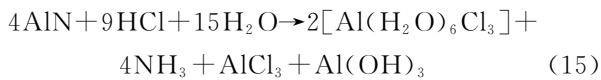
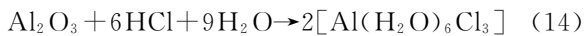
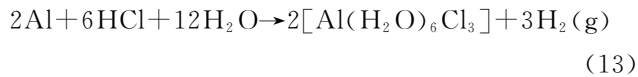
Fig.6 SEM photographs of acid-leached polymetric AlCl_3 by high pure aluminum Al ash

表 4 图 6 中高纯铝灰渣样 EDS 分析结果

Tab.4 EDS analysis of high pure aluminum ash

residue in Fig.6									%
区域	x_B								
	Al	O	C	Na	Cl	Zr	Fe	Ca	
A	24.97	53.79	—	—	21.23	—	—	—	
B	22.67	48.69	—	—	27.05	1.58	—	—	
C	18.24	49.03	9.34	—	23.39	—	—	—	
D	11.88	45.73	27.27	0.37	14.25	—	0.35	0.15	
E	10.08	51.64	7.67	—	30.62	—	—	—	

由于氢的原子序数低于 Be,EDS 分析时不显示 H 含量,A 处不规则团状块体为 AlCl_3 和 $\text{Al}(\text{OH})_3$ 形成的聚合物;B 处为 AlCl_3 、 $\text{Al}(\text{OH})_3$ 、 Al_3Zr 形成的聚合物;C 处为 AlCl_3 和 $\text{Al}(\text{OH})_3$ 形成的聚合物;D 处为 AlCl_3 和 $\text{Al}(\text{OH})_3$ 形成的聚合物;E 处为 AlCl_3 、 $\text{Al}(\text{OH})_3$ 、 $2\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$ 形成的聚合物。酸浸时,铝灰中的 Al、 Al_2O_3 和 AlN 大部分转化为聚合氯化铝,部分 C 也进入聚合氯化铝中。聚合氯化铝属于多核羟基配合物,分子结构介于 AlCl_3 和 $\text{Al}(\text{OH})_3$ 之间,化学式为 $[\text{Al}_2(\text{OH})_n\text{Cl}_{6-n} \cdot x\text{H}_2\text{O}]_m$,其中 $n=1\sim5$,表示聚合氯化铝中性程度, $m\leq6$,表示聚铝聚合程度。相关化学反应如下:



聚合氯化铝是 Al^{3+} 水解、聚合、沉淀动力学过程的中间产物,有六元环结构和 Kegging 结构两种理论。六元环理论认为, Al^{3+} 水解、羟基聚合过程,遵从由单体到六元环聚合物发展模式,即 $[\text{Al}_6(\text{OH})_{12}(\text{H}_2\text{O})_{12}]^{6+}$

结构,按多核链状络合机理形成稳定的苯环状结构集合体。

Kegging 结构理论认为,聚铝形成过程中, Al^{3+} 水解和聚合交替进行,随氯化铝由低聚体($\text{Al}_{6\sim8}$)向高聚体(Al_{10})转化,聚铝结构由四面体、八面体向高聚体转化。

根据六元环结构和 Kegging 结构理论,聚合氯化铝水解、聚合过程中,首先由羟基形成六元环稳定结构,八面体的氯化铝单聚体以一个顶点的 H 与六元环上的羟基聚合,随氯化铝由单聚体、双聚体向多聚体转化,聚铝结构由四面体、八面体向高聚体转化,形成外挂式多维网状结构聚合氯化铝。

3 结 论

(1)原始高纯铝灰由大小、形貌不一的、形状为长条状、柱状、棒状、球状颗粒组成。主要化学组成包括 56.90% 的 Al、39.15% 的 O、1.82% 的 Mg。铝灰物相主要包括 Al、 Al_2O_3 、 MgAl_2O_4 、AlN、 Al_2OC 、BaO 等。

(2)酸浸时,铝灰溶出率随温度升高而增大,在 65 $^{\circ}\text{C}$ 时溶出率达到最大值,超过 75 $^{\circ}\text{C}$,溶出率迅速下降。温度、反应时间一定,溶出率随液固比增大而增大,固液比达到 1:40,铝灰溶出过程趋于稳定。

(3)酸浸时,铝灰中 Al、 Al_2O_3 和 AlN 等含 Al 物相大部分转化为 $[\text{AlCl}_3(\text{H}_2\text{O})_6]$ 。随碱度增加,聚铝结构由四面体、八面体向高聚体转化,形成外挂式多维网状结构聚合氯化铝。

参 考 文 献

- [1] 桓书星,王耀武,狄跃忠,等.二次铝灰钙化煅烧提取氧化铝的试验研究[J].矿产保护与利用,2020,40(3):34-39.
- [2] 李帅,刘万超,刘中凯,等.铝灰处理技术现状及展望[J].有色金属(冶炼部分),2018(10):25-29..
- [3] 欧玉静,李小龙,智鹏阔,等.铝灰中 Al_2O_3 的回收工艺[J].化工科技,2018,26(6):31-36.
- [4] TRIPATHY A K, MAHALIK S, SARANGI C K, et al. A pyrohydrometal-lurgical process for the recovery of alumina from waste aluminium dross [J]. Minerals Engineering, 2019, 137: 181-186.

W 对 Co-Al-W 合金相界强度影响的理论研究

陈 律^{1,2} 刘逸众^{1,2} 任延岫^{1,2}

(1.长沙航空职业技术学院航空机电设备维修学院; 2.湖南省飞机维修工程技术研究中心)

摘 要 基于第一性原理赝势平面波方法,研究了 W 掺杂 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界前后其对电子分布与能态结构的变化。相界断裂功计算结果表明,W 原子取代界面内 γ' -Co₃Al 相区中的 Al 原子可提高 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界的断裂强度,而取代其他位置的 Al 原子或 Co 原子时,对其相界区域断裂强度的影响则不明显。进一步通过分析电子态密度与电子密度分布图发现,W 的掺杂使其与最近邻 Co 原子间所产生的强烈电子相互作用,将引起相界区域层间原子成键相互作用增强,这是 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界断裂强度得到提高的直接原因。

关键词 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界;相界断裂功;W 合金化

中图分类号 TG132.33⁺3 **文献标志码** A

DOI:10.15980/j.tzzz.2021.10.005

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



Theoretical Analysis on the Effect of W on the Phase Boundary Strength of Co-Al-W Alloy

Chen Lü^{1,2}, Liu Yizhong^{1,2}, Ren Yanxiu^{1,2}

(1.Aviation Electromechanical Equipment Maintenance Department, Changsha Aeronautical Vocational and Technical College; 2.Hunan Aircraft Maintenance Engineering Technology Research Center)

Abstract: The energetics and electronic structures of W doped γ -Co/ γ' -Co₃Al interface region model were calculated by the first principles method based on plane-wave pseudopotential theory. The results demonstrate that the substitution of W atom for Al atom sited in γ -Co/ γ' -Co₃Al interfaces can improve the rupture strength of the γ -Co/ γ' -Co₃Al interface. However, the substitution of W atom for Al or Co atom in other place has little effect on the rupture strength of the phase boundary region. The analysis of electron densities of states (DOS) and the distributions of valence electron densities of γ -Co/ γ' -Co₃Al interface indicate that the doping of W leads to the strong electron interaction between W and its nearest neighbor Co atoms, resulting in the enhancement of the interlayer atomic bonding interaction in the phase boundary region, which is the direct reason for the enhancement of the rupture strength of γ -Co/ γ' -Co₃Al phase boundary.

Key Words: γ -Co/ γ' -Co₃Al Interface, Interface Griffith Rupture Work, W Alloying

收稿日期:2021-03-03;修改稿收到日期:2021-03-23
基金项目:湖南省自然科学基金科教联合基金资助项目(2020JJ7076)
第一作者简介:陈律,男,1978 年出生,教授,长沙(410000),E-mail:6994980@qq.com
引用格式:陈律,刘逸众,任延岫. W 对 Co-Al-W 合金相界强度影响的理论研究[J]. 特种铸造及有色合金,2021,41(10):1 209-1 214.
CHEN L, LIU Y Z, REN Y X. Theoretical analysis on the effect of w on the phase boundary strength of Co-Al-W alloy[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2021, 41(10):1 209-1 214.

[5] CAO Y. Multi-stage electrostatic separation for recovering of aluminum from fine granules of black dross[J].Journal of Wuhan University of Technology-Mater. Sci. Ed., 2019, 34(4): 925-931.

[6] 贺永东,李颜凌,马斌,等.湿法工艺对二次铝灰无害化脱氮影响的研究[J].特种铸造及有色合金, 2020, 40(6): 679-683.

[7] 周扬民,谢刚.碱烧结法处理铝灰制备氢氧化铝[J].轻金属, 2015 (9): 12-14.

[8] 李玲玲,宋明,靳强.铝灰回收利用的研究进展[J].无机盐工业, 2018, 50(8): 6-10.

[9] YOLDI M. Efficient recovery of aluminum from saline slag wastes [J].Minerals Engineering, 2019, 140: 105 884.

[10] 吕帅帅,倪威,倪红军,等.铝灰渣中 AlN 水解行为及其多元非线性回归分析[J].中国有色金属学报, 2020, 30(4): 920-926.

[11] 郭学益,李菲,田庆华,等.二次铝灰低温碱性熔炼研究[J].中南大学学报, 2012, 43(3): 809-814.

[12] 张宁燕.碱法焙烧脱除二次铝灰中的氟、氯元素及铝的回收[J].新疆有色金属, 2019(2): 47-49.

[13] 戴翔,焦少俊,郑洋,等.利用含氟盐熔剂产生的二次铝灰的危险特性分析[J].无机盐工业, 2018, 50(11): 42-44.

[14] 鲍善词,李素芹.二次铝灰中氟、氯的浸出与回收分析[J].中国冶金, 2018, 28(10): 24-28.

[15] 杜凯峰,汪兴兴,倪红军,等.以含铝资源制备聚合氯化铝及其工艺研究进展[J].现代化工, 2018, 38(8): 48-51.

(编辑:栗万仲)