

---

**PRACE**

**Instytutu Ceramiki  
i Materiałów Budowlanych**

---

***Scientific Works***  
of Institute of Ceramics  
and Building Materials

---

**Nr 11**

ISSN 1899-3230

**Rok V**

**Warszawa–Opole 2012**

---

TAMARA MALINOWSKA\*  
IZABELA MAJCHROWICZ\*\*  
JERZY CZECHOWSKI\*\*\*

## Program FactSage – nowe narzędzie w pracach nad doborem wyłożyń ogniotrwałych urządzeń cieplnych

**Słowa kluczowe:** obliczenia termodynamiczne, materiały ogniotrwałe, metalurgia cynku, piec szybowy, kotły energetyczne, spalanie biomasy.

W artykule przedstawiono analizy termodynamiczne z użyciem programu obliczeń termodynamicznych FactSage. Jest to jedno z możliwych narzędzi do analiz termodynamicznych układów wielofazowych. Wykorzystując go, przeprowadzono ocenę wpływu różnych czynników korozyjnych na zużycie wyrobów ogniotrwałych pieca szybowego w hutnictwie cynku i kotłów energetycznych do spalania biomasy. Określono ilości i składy chemiczne powstałej fazy ciekłej i gazowej w zależności od temperatury. Analiza ta umożliwiła wyodrębnienie materiałów potencjalnie najbardziej odpornych chemicznie na działanie czynników korozyjnych, w tym również gazowych. Uzyskane wyniki potwierdziły przydatność programu w analizowanych przypadkach przedstawionych w artykule.

### 1. Wstęp

Wykonanie złożonych analiz termodynamicznych umożliwiają programy komputerowe, które skracają proces obliczeń, przyczyniając się do ograniczenia kosztownych i trudnych badań eksperymentalnych. Opierają się one na kryterium minimum entalpii swobodnej Gibbssa układu oraz na prawie działania mas [1]. Komputerowe systemy obliczeniowe składają się z programów obliczeniowych zintegrowanych z odpowiednimi bazami danych. Poprawność otrzymanych obliczeń w dużej mierze zależy od danych termodynamicznych zawartych w bazach,

---

\* Mgr inż., Instytut Ceramiki i Materiałów Budowlanych w Warszawie, Oddział Materiałów Ogniotrwałych w Gliwicach.

\*\* Mgr inż., Instytut Ceramiki i Materiałów Budowlanych w Warszawie, Oddział Materiałów Ogniotrwałych w Gliwicach.

\*\*\* Dr inż., Instytut Ceramiki i Materiałów Budowlanych w Warszawie, Oddział Materiałów Ogniotrwałych w Gliwicach.

do których odwołują się wspomniane programy opierające się na odpowiednio opracowanych modelach matematycznych.

Każdy system charakteryzuje się pewnymi ograniczeniami, które mogą rzutować na uzyskane wyniki prowadzonych obliczeń i analiz. Dla tego wybór odpowiedniej procedury w pewnym stopniu może decydować o skuteczności i szybkości obliczeń. Przy modelowaniu skomplikowanych procesów chemicznych konieczne jest stosowanie mniej lub bardziej idących uproszczeń, a uzyskane wyniki powinny być traktowane jako orientacyjne i weryfikowane na drodze eksperymentu.

## 2. Charakterystyka programu FactSage

Obliczeniowe programy termochemiczne o różnym stopniu złożoności zostały szeroko wykorzystywanym narzędziem do realizacji prac badawczych. Do najwęższych z nich należą np.: FactSage, THERMO-CALC, MTDATA, ThermoSuite, PANDAT i HSC Chemistry [2]. Przy ich użyciu przeprowadzają się obliczenia termochemiczne, które pozwalają na określenie przebiegu reakcji w zadanych warunkach, rodzaju powstających produktów oraz efektów cieplnych. Obliczenia odnoszą się do stanu równowagi, nie uwzględniają kinetyki reakcji.

Jednym z najwyżej cenionych programów termodynamicznych, który z powodzeniem można stosować w pracach badawczych z zakresu materiałów ogniotrwałych, jest program FactSage. Program ten opracowany został w 2001 r. jako połączenie dwóch znanych modułów programowych: F\*ACT/FACT-Win i ChemSage [3–4]. FactSage stanowi zintegrowany system danych termodynamicznych nieorganicznych związków chemicznych, którego bazą są systemy termodynamiczne uzupełnione. Program pracuje w środowisku Microsoft Windows i składa się z różnych modułów pogrupowanych w czterech kategoriach [3–4]:

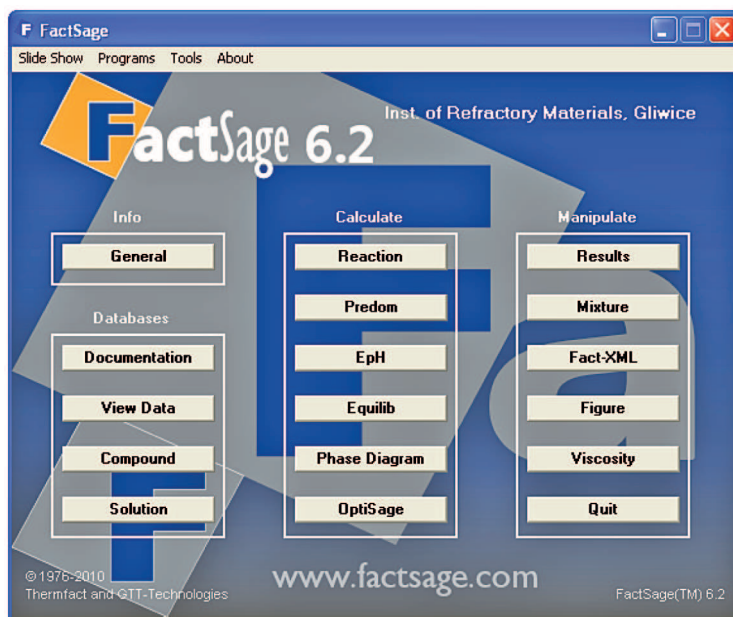
1. **Info** – zawiera szczegółowe pokazy slajdów (Microsoft Power Point) większości modułów programu i ogólne informacje na temat FactSage i jego baz danych.
2. **Databases** – moduły programu umożliwiające użytkownikowi przeglądanie, wybór i redagowanie baz danych dla czystych substancji i roztworów.
3. **Calculate** – kluczowe moduły programu umożliwiające obliczenie równowag termodynamicznych w zadanych układach fazowych oraz generowanie diagramów fazowych z bezpośrednim dostępem do baz danych.

Moduły grupy obliczeniowej:

- **Reaction** – obliczenie zmian wartości funkcji termodynamicznych (H, G, S, A) czystych pierwiastków i związków chemicznych oraz obliczenie zmian objętości i ciepła właściwego (V, Cp);
- **Predom** – obliczenie i generowanie diagramów jedno-, dwu- i trójskładnikowych układów równowagi metal–niemetal w warunkach izotermicznych przy użyciu baz danych substancji czystych;

- **EpH** – obliczanie i generowanie diagramów jedno-, dwu- i trójskładowych układów równowagi elektrochemicznej dla roztworów wodnych w warunkach izotermicznych;
  - **Equilib** – obliczenie stanu równowagi termodynamicznej w złożonych układach wieloskładnikowych przy zastosowaniu kryterium minimum entalpii swobodnej Gibbsa, wykorzystując bazy danych czystych substancji i roztworów. Moduł oblicza stężenia produktów reakcji w zadanym układzie;
  - **Phase Diagram** – obliczanie i generowanie diagramów fazowych układów prostych i złożonych w różnych kombinacjach T, P, V, składu, aktywności, potencjału chemicznego itd. przy użyciu baz danych związków i roztworów;
  - **OptiSage** – optymalizacja danych termodynamicznych i diagramów fazowych, generowanie wartości entalpii swobodnej Gibbsa przy użyciu danych eksperymentalnych.
4. **Manipulate** – moduły umożliwiające przetwarzanie, obróbkę i opracowanie wyników w formie tabelarycznej i graficznej.

Na rycinie 1 przedstawiono okno główne programu FactSage umożliwiające dostęp do modułów wyżej wymienionych kategorii.



Źródło: Program FactSage 6.2.

Ryc. 1. Okno główne programu FactSage

### 3. Zakres wykonanych obliczeń termodynamicznych przy użyciu programu FactSage i ich analiza

Celem wykonanych obliczeń termodynamicznych w zakresie doboru wyłożeń ogniotrwałych przy użyciu programu FactSage była ocena wpływu czynników korozyjnych na zużycie badanych materiałów, by zwiększyć ich trwałości w warunkach pracy.

Obliczenia wykonano przy wykorzystaniu modułu obliczeniowego – Equilib, którego działanie oparte jest na zasadzie minimalizacji entalpii swobodnej Gibbssa. Moduł oblicza stężenia i rodzaj składników układów wielofazowych w stanie równowagi w określonych warunkach temperatury i ciśnienia. W celu wykonania obliczenia należy kolejno zdefiniować skład chemiczny reagentów, następnie dobrać możliwe produkty układu, a na końcu zdefiniować warunki procesu (temperatura, ciśnienie lub inne parametry). Po wykonaniu obliczeń dla przyjętych warunków procesu wyniki automatycznie przedstawiane są w oknie Results Window. Masy poszczególnych produktów układu odpowiadają bilansowi masowemu procesowi oraz możliwie najniższej wartości entalpii swobodnej Gibbssa. Otrzymane produkty mogą zawierać czyste substancje chemiczne, roztwory doskonałe i roztwory rzeczywiste zdefiniowane w odpowiednich bazach danych [2, 4].

W artykule przedstawiono przykłady wykorzystania programu FactSage do rozwiązywania problemów wiążących się ze stosowaniem materiałów ogniotrwałych.

#### 3.1. Dobór wyłożenia ogniotrwałego do pieca szybowego w hutnictwie cynku

Przeprowadzono badania mające określić mechanizm zwiększonego zużycia wymurówki pieca szybowego w hutnictwie cynku. To zwiększone zużycie wyłożenia ogniotrwałego nastąpiło po zmianie wsadu, z pierwotnego, siarczkowego, na tlenkowy, pochodzący z recyklingu. Obserwowano miejscowe ubytki wymurówki, niebędącej w kontakcie ze wsadem, co sugerowało przebieg reakcji pomiędzy wymurówką a gazami obecnymi w atmosferze pieca [5]. By wyznaczyć produkty reakcji wybranych wyrobów z gazami, posłużono się programem obliczeniowym FactSage.

##### Charakterystyka procesu

Wykonano obliczenia termodynamiczne za pomocą modułu Equilib, w celu określenia reakcji wyłożenia ogniotrwałego wykonanego z wyrobów wysokoglinowych z gazami obecnymi w atmosferze pieca szybowego w temperaturze 1250°C, pod ciśnieniem 1 atm. Analizę termodynamiczną przeprowadzono rów-

niez dla wyrobów: korundowych, z węgla krzemu na wiązaniu azotkowym, magnezjowo-chromitowych, magnezjowo-spinelowych i spinelowych z dodatkiem chromu, celem wskazania odpowiedniego materiału na wyłożenie pieca szybowego, którego zastosowanie pozwoliłoby na zwiększenie trwałości wymurówki w trudniejszych warunkach pracy pieca.

Czynnikiem korozyjnym był gaz obecny w atmosferze pieca szybowego w hutnictwie cynku, stanowiący mieszaninę chloru i fluoru. Do obliczeń przyjęto uproszczone składy chemiczne materiałów ogniotrwałych, które zestawiono w tabeli 1. Analizę przeprowadzono osobno dla poszczególnych składników gazu.

T a b e l a 1

Skład chemiczny materiałów ogniotrwałych

Rodzaj materiału	Skład chemiczny [% mas.]					
	wysokoglinowy	korundowy	z węgla krzemu	magnezjowo-chromitowy	magnezjowo-spinelowy	spinelowy z dodatkiem chromu
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	72,8	96,7	–	4,3	12,7	7,8
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1,2	0,8	–	4,5	0,6	14,8
SiO <sub>2</sub>	26,0	2,5	–	4,6	0,8	0,9
SiC	–	–	76,5	–	–	–
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	–	–	23,5	–	–	–
MgO	–	–	–	75,9	85,9	51,8
Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	–	–	–	10,7	–	23,7
CaO	–	–	–	–	–	0,9

Ź r ó d ł o: Opracowanie własne.

Przyjęto następujący skład mieszaniny reakcyjnej: 50 g materiał ogniotrwały i 50 g faza gazowa.

Obliczono ilość i rodzaj powstałych związków (fluorków i chlorków) w fazie gazowej w kontakcie z poszczególnymi wyrobami ogniotrwałymi.

#### Analiza termodynamiczna układu

Uzyskane wyniki obliczeń termodynamicznych dla wybranych wyrobów ogniotrwałych w temperaturze 1250°C zestawiono w tabelach 2 i 3.

T a b e l a 2

Rodzaj i ilość powstałych związków w fazie gazowej w reakcji wyrobu z fluorem obecnym w atmosferze pieca szybowego w temperaturze 1250°C

Rodzaj powstającego związku	Ilość powstałych związków w kontakcie z poszczególnymi wyrobami [%]					
	wysokoglinowy	korundowy	z węgla krzemu	magnezjowo-chromitowy	magnezjowo-spinelowy	spinelowy z dodatkiem chromu
AlF <sub>3</sub> – ciało stałe	46,83	63,16	–	10,01	28,64	14,79
SiF <sub>4</sub> – gaz	23,21	2,29	25,23	11,47	2,04	1,84
FeF <sub>3</sub> – ciało stałe	0,91	0,60	–	9,15	1,25	24,71
SiHF <sub>3</sub> – gaz	–	–	4,29	–	–	–

Ź r ó d ł o: Jak w tab. 1.

T a b e l a 3

Rodzaj i ilość powstałych związków w fazie gazowej w reakcji wyrobu z chlorem obecnym w atmosferze pieca szybowego w temperaturze 1250°C

Rodzaj powstającego związku	Ilość powstałych związków w kontakcie z poszczególnymi wyrobami [%]					
	wysokoglinowy	korundowy	z węgla krzemu	magnezjowo-chromitowy	magnezjowo-spinelowy	spinelowy z dodatkiem chromu
MgCl <sub>2</sub> – ciecz	–	–	–	32,31	37,12	26,62
SiCl <sub>4</sub> – ciecz	–	–	86,73	–	–	–
AlCl <sub>3</sub> – gaz	1,88	2,09	–	–	–	–
CrO <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> – ciecz	–	–	–	0,44	–	0,40
FeCl <sub>3</sub> – gaz	1,77	1,18	–	4,45	0,67	12,18
FeCl <sub>2</sub> – gaz	0,49	0,33	–	1,72	0,25	4,92
CaCl <sub>2</sub> – ciecz	–	–	–	–	–	0,94

Ź r ó d ł o: Jak w tab. 1.

Na podstawie przeprowadzonych obliczeń termodynamicznych stwierdzono, że nadmierne zużycie wymurówki pieca szybowego wykonanej z wyrobów wysokoglinowych może być wynikiem korozji gazowej głównie pod wpływem działania fluoru. W trakcie tego procesu dochodzi do selektywnej reakcji fluoru z tlenkiem glinu oraz obecną w wyrobach krzemionką, prowadzącą do powstania gazowego fluorku krzemu SiF<sub>4</sub>. Agresywnym czynnikiem jest również chlor, który reaguje z tlenkiem glinu i z tlenkiem żelaza w materiale. W wyniku reakcji wymurówki z chlorem dochodzi do utworzenia chlorków glinu AlCl<sub>3</sub> oraz żelaza FeCl<sub>3</sub> i FeCl<sub>2</sub>, które wpływają na degradację wyrobów i ubytek wyłożenia [5].

Wśród pozostałych wyrobów najmniejszą ilością generowanego gazowego fluorku krzemu charakteryzują się materiały spinelowe z dodatkiem chromu i magnezowo-spinelowe (odpowiednio 1,84 i 2,04%), jednakże w wyniku reakcji tych wyrobów z chlorem, powstaje duża ilość chlorku magnezu o temperaturze topnienia 714°C [5]. Może to powodować mięknięcie wyrobów w temperaturze pracy i w konsekwencji zniszczenie wymurówki.

Analizując uzyskane wyniki dla wyrobów przedstawionych w tabeli 2 i 3, do zastosowań w warunkach pracy pieca szybowego można wskazać wyroby korundowe. Co prawda, wyroby te nie są całkowicie odporne na działanie gazów obecnych w atmosferze pieca, jednak ilość powstającego gazu fluorku krzemu jest 10-krotnie mniejsza w porównaniu do stosowanych wyrobów wysokoglinowych. Spowodowane jest to zmniejszonym udziałem  $\text{SiO}_2$  w wyrobach korundowych w porównaniu do wyrobów wysokoglinowych. Ze względu na najwyższą zawartość  $\text{Al}_2\text{O}_3$  spośród analizowanych materiałów w wyrobach korundowych w kontakcie z fluorem powstają znaczne ilości stałego  $\text{AlF}_3$  (ok. 63%). Powstały fluorek glinu jednak nie powinien wpływać na degradację wyrobu, ponieważ posiada wyższą temperaturę topnienia niż temperatura pracy wyłożenia. Wyroby korundowe generują w reakcji z gazami nieznacznie więcej chlorku glinu (o 0,2%), jednak sumaryczna ilość powstających, niekorzystnych produktów korozji gazowej jest mniejsza w stosunku do wyrobów wysokoglinowych i zasadowych. Można zatem sądzić, że wyłożenie pieca szybowego wykonane z wyrobów korundowych będzie trwalsze, niż wyłożenie wykonane z wyrobów wysokoglinowych.

Należy zwrócić uwagę na to, że obliczenia odnoszą się do stanu równowagi, nie uwzględniają kinetyki reakcji, a zatem ich analiza może posłużyć jedynie do ustalenia kierunku reakcji.

### **3.2. Dobór wyłożenia ogniotrwałego kotłów energetycznych (w tym fluidalnych) do spalania biomasy**

Przeprowadzono obliczenia termodynamiczne FactSage w celu określenia oddziaływania popiołów ze współspalania węgla i biomasy na betony ogniotrwałe o zróżnicowanym składzie.

Określono temperaturę pojawienia się fazy ciekłej i zmiany jej udziału w funkcji temperatury.

#### **Charakterystyka procesu**

Obliczenia wykonano przy wykorzystaniu modułu Equilib, przy założeniu stałego ciśnienia równego 1 atm. Parametrami zmiennymi była temperatura (950°–1400°C) oraz ilości i rodzaj reagentów. Przyjęto założenie, że najbardziej narażona na działanie popiołu będzie osnowa betonów ogniotrwałych i dlatego też obliczono ich składy chemiczne w zależności od rodzaju betonu [6]. Przybliżone



składy chemiczne uwzględnione w obliczeniach dla osnowy betonów niskocementowych (boksytowego, spinelowego, korundowego i korundowego z dodatkiem  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ), popiołów z biomasy i z węgla przedstawiono w tabelach 4 i 5. W obliczeniach uwzględniono popioły ze współspalania węgla, odpadów komunalnych i łusek prosa.

Przyjęto następujący skład mieszaniny reakcyjnej: 100 g osnowa betonu ogniotrwałego, 20 g popiół z biomasy i 80 g popiół z węgla.

Tabela 4

*Skład chemiczny osnowy wybranych betonów ogniotrwałych niskocementowych*

Rodzaj osnowy betonu niskocementowego	Skład chemiczny [% mas.]						
	$\text{Al}_2\text{O}_3$	$\text{SiO}_2$	CaO	$\text{Fe}_2\text{O}_3$	$\text{TiO}_2$	MgO	$\text{Cr}_2\text{O}_3$
Boksytowego	72	20	5	1	2	–	–
Spinelowego	76	7	5	–	–	12	–
Korundowego	78	16	5	–	–	–	–
Korundowego z dodatkiem $\text{Cr}_2\text{O}_3$	68	16	5	–	–	–	10

Źródło: Jak w tab. 1.

Tabela 5

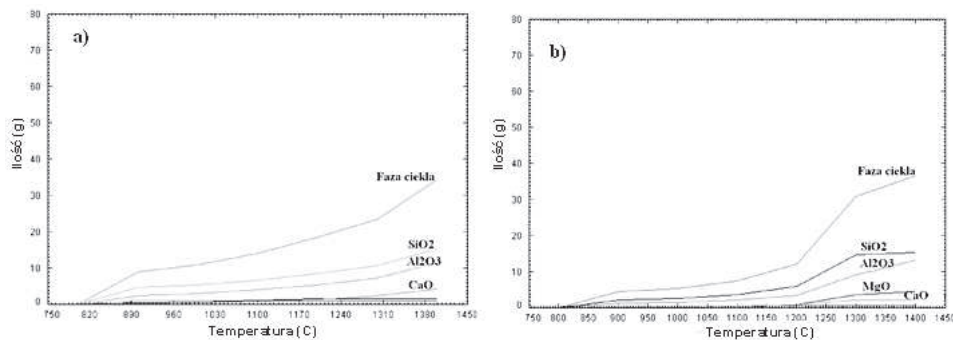
*Skład chemiczny popiołów z węgla, odpadów komunalnych i łusek prosa*

Składnik	Zawartość [% mas.]		
	popiół z węgla	popiół z odpadów komunalnych	popiół z łusek prosa
$\text{SiO}_2$	55	38	65
$\text{Al}_2\text{O}_3$	30	11	4
$\text{Fe}_2\text{O}_3$	4	3	1
CaO	2	29	–
MgO	2	2	5
$\text{P}_2\text{O}_5$	1	2	16
$\text{TiO}_2$	1	1	–
$\text{Na}_2\text{O}$	1	3	–
$\text{K}_2\text{O}$	3	4	9
$\text{SO}_3$	1	7	–

Źródło: Jak w tab. 1.

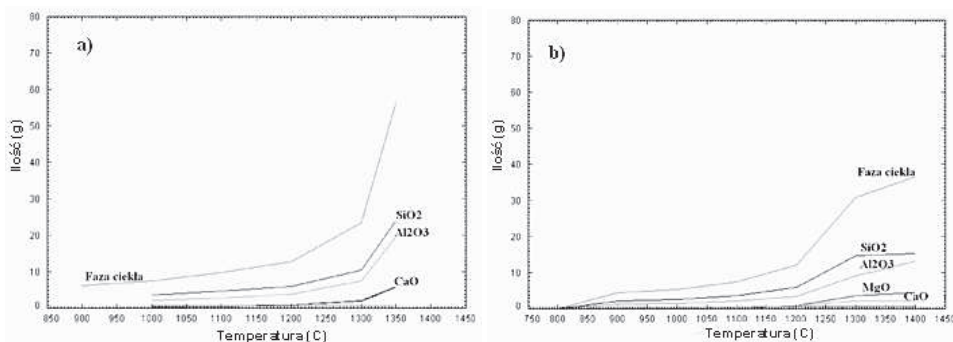
### Analiza termodynamiczna układu

Na rycinach 2–4 przedstawiono przykładowe zależności udziału fazy ciekłej oraz udziału poszczególnych tlenków w tej fazie ( $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , CaO, MgO) od temperatury w przypadku oddziaływania popiołów ze współspalania węgla i odpadów komunalnych oraz węgla i łusek prosa z osnową w niskocementowym betonie boksytowym, spinelowym i korundowym z dodatkiem  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ .



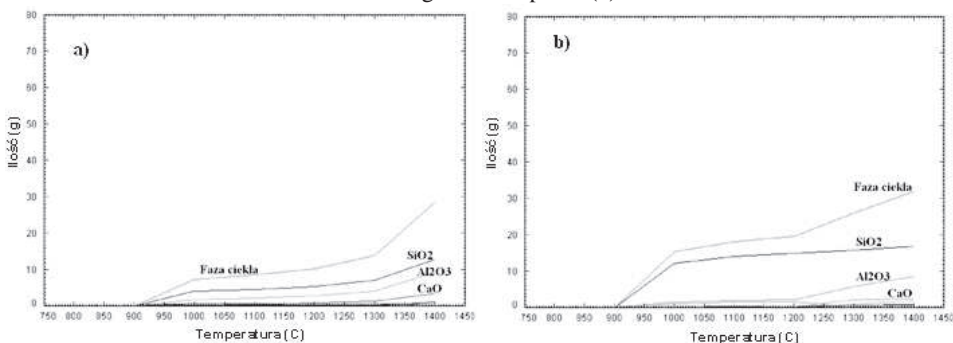
Źródło: Jak w ryc. 1.

Ryc. 2. Udział fazy ciekłej i poszczególnych tlenków w tej fazie w mieszaninie osnowy betonu boksytowego i popiołów powstających ze współpalania węgla i odpadów komunalnych (a) oraz węgla i łusek prosa (b)



Źródło: Jak w ryc. 1.

Ryc. 3. Udział fazy ciekłej i poszczególnych tlenków w tej fazie w mieszaninie osnowy betonu spinelowego i popiołów powstających ze współpalania węgla i odpadów komunalnych (a) oraz węgla i łusek prosa (b)



Źródło: Jak w ryc. 1.

Ryc. 4. Udział fazy ciekłej i poszczególnych tlenków w tej fazie w mieszaninie osnowy betonu korundowego z dodatkiem  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  i popiołów powstających ze współpalania węgla i odpadów komunalnych (a) oraz węgla i łusek prosa (b)

Na podstawie przedstawionych wyników obliczeń można stwierdzić, że oddziaływanie popiołów ze spalania odpadów komunalnych na betony powoduje pojawienie się fazy ciekłej w stosunkowo niskich temperaturach, poniżej  $800^{\circ}\text{C}$  w przypadku betonu boksytowego i spinelowego. Skład odpadów komunalnych wpływa na obniżenie temperatury pojawienia się fazy ciekłej dla osnowy wyżej wymienionych betonów w porównaniu do biomasy z łusek prosa. Wadą biomasy stosowanej w kotłach energetycznych jest jej skład chemiczny, jednak charakteryzuje się ona z reguły mniejszym udziałem popiołu niż w węglu kamiennym (przeciętnie ok. 22%) [6]. Głównymi składnikami popiołu z węgla są  $\text{SiO}_2$  i  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , natomiast popioły z biomasy charakteryzuje znaczny udział tlenków potasu ( $\text{K}_2\text{O}$ ) i wapnia ( $\text{CaO}$ ) (tab. 5). Ponadto w większości rodzajów biomasy, jak na przykład w łuskach prosa, wysoka jest zawartość  $\text{P}_2\text{O}_5$ . Ze względu na obecność tlenków metali alkalicznych w popiołach faza ciekła pojawia się już w stosunkowo niskich temperaturach.

W przypadku betonu korundowego z dodatkiem  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  faza ciekła pojawia się ok.  $900^{\circ}\text{C}$ , tak więc w warunkach pracy kotłów fluidalnych, w których spalanie prowadzi się w stosunkowo niskich temperaturach nie powinno dochodzić do korozji czołowej w efekcie nadtapiania i spływania wyłożeń wykonanych z betonów tego rodzaju [6].

Przeprowadzone obliczenia umożliwiły stwierdzenie, że dodatek  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  wpływa na podwyższenie temperatury pojawienia się fazy ciekłej. Betony korundowe, a w szczególności z udziałem dodatku  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ , charakteryzują stosunkowo małe przyrosty fazy ciekłej ze wzrostem temperatury w przypadku wszystkich badanych popiołów ze współspalania węgla i biomasy.

Najmniej odporna na działanie popiołów ze współspalania węgla i biomasy była osnowa betonów spinelowych, w przypadku której przyrosty fazy ciekłej powyżej  $1200^{\circ}\text{C}$  były znaczne. Jej reakcja z popiołami ze współspalania węgla i odpadów komunalnych prowadziła do gwałtownego przyrostu fazy ciekłej powyżej  $1300^{\circ}\text{C}$ .

#### 4. Podsumowanie

Dla układów wieloskładnikowych, zawierających składniki wsadu, składniki materiałów ogniotrwałych oraz składniki fazy gazowej, metody eksperymentalne opisu zjawisk są często trudne do zastosowania i czasochłonne, a programy do obliczeń termodynamicznych stają się narzędziem ułatwiającym analizę zachodzących w wysokich temperaturach reakcji pomiędzy materiałami ogniotrwałymi a czynnikami korozyjnymi. Obliczenia termodynamiczne odnoszą się do stanu równowagowego, nie uwzględniają kinetyki reakcji, lepkości stopu, wzajemnego rozmieszczenia faz stałych w materiale i rozszerzalności cieplnej, co należy brać pod uwagę przy interpretacji i analizie wyników obliczeń doty-

czących zjawisk korozji metali w ogniotrwałych. Umożliwiła ona określenie kierunku reakcji, spodziewanych produktów i w ten sposób wybór korzystniejszych rozwiązań metalicznych.

Wykorzystując program FactSage, przeprowadzono ocenę wpływu różnych czynników korozyjnych na zużycie wyrobów ogniotrwałych pieca szybowego w hutnictwie cynku i kotłów energetycznych do spalania biomasy. Poprzez określenie ilości i składu chemicznego powstałej fazy ciekłej i gazowej w zależności od temperatury, podjęto próbę wskazania odpowiednich wyrobów ogniotrwałych dla danego procesu.

Z pomocą modułu Equilib określono kierunek przebiegu reakcji wyrobów wysokoglinowych, które były zastosowane jako wyłożenie ogniotrwałe pieca szybowego w hutnictwie cynku, z gazami (fluorem i chlorem) obecnymi w atmosferze pieca szybowego w temperaturze 1250°C. Stwierdzono, że główną przyczyną przyspieszonego zużycia wyłożenia ogniotrwałego pieca szybowego było oddziaływanie fluoru, prowadzącego do powstania fluorku krzemu SiF<sub>4</sub>. W celu poszukiwania innych metali ogniotrwałych dla zastąpienia wyrobów wysokoglinowych, przeprowadzono symulację termodynamiczną dla wyrobów: korundowych, z węglkiem krzemu i wiązaniem zotowym, mączajowo-chromitowych, mączajowo-spinelowych i spinelowych z dodatkiem chromu. Jak wykazuje w przeprowadzonej analizie, korzystnym metalem w wyniku oddziaływania fluoru i chloru może być wyrób korundowy, który został zalecony do zastosowania jako wyłożenie pieca szybowego [5].

Również w przeprowadzonych obliczeniach termodynamicznych oddziaływanie popiołów ze współspalaniem węgla i biomasy na betony ogniotrwałe o zróżnicowanym składzie, wykazuje przydatność programu FactSage w doborze metali ogniotrwałych. Poprzez określenie temperatury powstania fazy ciekłej i zmiany jej udziału w funkcji temperatury, wykazuje korzystny wpływ tlenku Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> na właściwości użytkowe betonów korundowych. Wyniki to z tego, że dodatek Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> wpływa po pierwsze na podwyższenie temperatury powstania fazy ciekłej, i po drugie – betony te charakteryzowały się stosunkowo małymi przyrostami fazy ciekłej ze wzrostem temperatury w przypadku wszystkich badanych popiołów ze współspalaniem węgla i biomasy.

Tym samym wykazuje przydatność programu FactSage w przewidywaniu różnorodnych fazowych w korozji metali w ogniotrwałych i ich doborze jako wyłożenie ogniotrwałe.

## Literatura

[1] Pelton A.D., *Thermodynamic database development-modeling and phase diagram calculations in oxide systems*, „*Journal of Materials*” 2006, Vol. 25, No. 5, s. 473–480.

- [2] D r o ǳ d ǳ P., F a l k u s J., *Badania rozpuszczalności azotu w ciekłym roztworze żelaza w oparciu o analizę stanów równowagi w układach wielofazowych*, „Hutnik, Wiadomości Hutnicze” 2006, nr 11, s. 490–494.
- [3] B a l e C.W., C h a r t r a n d P., D e g t e r o v S.A., E r i k s s o n G., H a c k K., B e n M a h f o u d R., M e l a n ę o n J., P e l t o n A.D., P e t e r s e n S., *FactSage Thermochemical Software and Database*, „Calphad” 2002, Vol. 26, No. 2, s. 189–228.
- [4] B a l e C.W., B é l i s l e E., C h a r t r a n d P., D e g t e r o v S.A., E r i k s s o n G., H a c k K., J u n g I.-H., K a n g Y.-B., M e l a n ę o n J., P e l t o n A.D., R o b e l i n C., P e t e r s e n S., *FactSage thermochemical software and databases – recent developments*, „Calphad” 2009, Vol. 33, No. 2, s. 295–311.
- [5] M a j c h r o w i c z I., B a r a ń s k i J., M a l i n o w s k a T., Dobór odpowiednich wyrobów ogniotrwałych warunkujących wyższą trwałość wyłożenia pieca szybowego niż uzyskiwana obecnie. Sprawozdanie nr 582751/2011, niepublikowane.
- [6] C z e c h o w s k i J., J e d y n a k L., W a ł ę g a - C h w a s t e k H., M a j c h r o w i c z I., M a l i n o w s k a T., Materiały monolityczne dla potrzeb przemysłu chemicznego i petrochemicznego. Badania możliwości zwiększenia odporności korozyjnej betonów ogniotrwałych poddanych zmiennym oddziaływaniom korozyjnym. Sprawozdanie nr 3670/100377/GB/BT/2010, niepublikowane.

TAMARA MALINOWSKA  
IZABELA MAJCHROWICZ  
JERZY CZECHOWSKI

#### PROGRAM FACTSAGE – NEW TOOL IN SELECTION OF THE REFRACTORY LINING IN THERMAL DEVICES

**Keywords:** thermodynamic calculations, refractory materials, zinc metallurgy, shaft furnace, power boilers, combustion of biomass.

This article presents the thermodynamic analysis carried out by FactSage software. This program is one of the possible tool in case of complex thermodynamic analysis in multiphase system. The influence of different corrosion factors on the wear of refractory lining in the shaft furnace in zinc metallurgy and in the power boilers for combustion of biomass was evaluated by means of this software. The amounts and chemical compositions of formed liquid and gaseous phase depending on temperature have been calculated. This analysis allowed the identification of materials which are the most resistant to corrosive factors. The results of calculations have confirmed the suitability of application of the FactSage in solving problems presented in this article.