

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ШЛАКОВОГО РАСПЛАВА С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ЧИСЛОМ СОРТОВ КАТИОНОВ И АНИОНОВ

В.Н. Власов

Жидкие металлургические шлаки в соответствии с их физико-химическими характеристиками относят к категории ионных расплавов [1, 2]. Известно, что главными исходными составляющими металлургических шлаков являются оксиды. Помимо оксидов исходными компонентами шлаков могут являться также фториды, сульфиды и некоторые другие группы соединений, поставляющие в расплав при плавлении различные сорта катионов и анионов.

Термодинамические свойства шлаковых расплавов определяются их составом и температурой. Поскольку диапазон составов промышленных шлаков широк, экспериментальное исследование их термодинамических характеристик представляет сложную задачу. Изучение даже таких относительно простых объектов, как тройные или четверные системы, является трудоемким и длительным. Исследование свойств пяти-, шестикомпонентных и более сложных систем является еще более сложным, поэтому в литературе содержатся сведения о результатах экспериментального изучения лишь их отдельных фрагментов. В условиях значительного дефицита экспериментальной информации [3-5] основные надежды на получение термодинамических данных о сложных по составу жидких шлаках связываются с модельными методами химической термодинамики, опирающимися на экспериментальные данные о свойствах простых систем, и связывающих на основе теоретических положений свойства простых и многокомпонентных расплавов.

В работе [6] было опубликовано описание термодинамической модели оксидного шлакового расплава, содержащего один сорт анионов - анионы кислорода. В основу этой модели были положены представления об островной структуре ионных расплавов, находящихся в условиях относительно небольшого перегрева над температурой ликвидуса [7]. Теоретические положения термодинамической модели сводились к следующему. Структурными составляющими шлакового расплава являются простейшие по составу ионы, сгруппированные в микрокомплексы (островки), имеющие в пределах нескольких координационных сфер кристаллоподобное упорядочение по типу твердых фаз. Островки неупорядочены во взаимном расположении относительно друг друга, являются неустойчивыми короткоживущими динамическими образованиями, связанными друг с другом непрерывным обменом частиц. Эти образования отражают усредненный состав расплава, разрушаясь в одном месте, они возникают в дру-

гом и поэтому не могут рассматриваться в качестве микро-фаз. Координационные числа катионов в таких микрокомплексах постоянны и по своим величинам близки к координационным числам соответствующих катионов в жидких простых оксидах. Предложенная термодинамическая модель показала свою хорошую эффективность в термодинамических расчетах [8-12]. Это сделало целесообразным расширение области ее применения на более сложные по составу (полианионные) шлаковые расплавы, что и стало задачей данной работы.

Рассмотрим ионный расплав, содержащий k сортов катионов и l сортов анионов. Допустив при образовании расплава полную электролитическую диссоциацию всех исходных компонентов на простейшие катионы и анионы, выразим общее количество катионов ($N_{\text{кат}}$) и общее количество анионов ($N_{\text{ан}}$) в расплаве соотношениями:

$$N_{\text{кат}} = N_0 \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^+ m_{ij}, \quad (1)$$

$$N_{\text{ан}} = N_0 \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^- m_{ij}. \quad (2)$$

Здесь N_0 - число Авогадро; v_{ij}^+ и v_{ij}^- - количества катионов и анионов (соответственно), образующихся при диссоциации молекулы компонента (ij); m_{ij} - числа молей исходных молекулярных компонентов (ij) в системе.

Ионные доли катиона произвольного сорта (s) и аниона произвольного сорта (i) в расплаве в этом случае будут определяться уравнениями:

$$x_s = \sum_{j=1}^l v_{sj}^+ m_{sj} / N_{\text{кат}}, \quad (3)$$

$$y_i = \sum_{j=1}^l v_{ij}^- m_{ij} / N_{\text{ан}}. \quad (4)$$

Будем считать, что зависимость среднего значения координационного числа катиона сорта (s) в полианионном расплаве z_s^+ (равного среднему числу анионов в его ближайшей координационной сфере) от анионного состава расплава характеризуется функцией

$$\bar{z}_s^+ = \sum_{j=1}^l z_{sj}^+ y_j, \quad (5)$$

в которой величины z_s^+ соответствуют значениям координационных чисел катиона сорта (s) в чистых жидких компонентах (sj).

Представим энергию расплава в виде суммы

энергий чистых жидких компонентов и избыточной энергии, характеризующей эффект образования расплава

$$E = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l m_{ij} E_{ij}^0 + E^{изб}. \quad (6)$$

Здесь E_{ij}^0 - молярная энергия чистого жидкого компонента (y).

Появление слагаемого $E^{изб}$ будем связывать с двумя главными факторами: различиями в структурах жидких компонентов и зависимостью величин энергий связей между катионами и анионами в расплаве от состава расплава.

Число связей катионов сорта (i) в расплаве с окружающими их анионами будем определять соотношением

$$N_{св} = \sum_{j=1}^l v_{ij}^+ m_{ij} N_0 z_i^+ = \sum_{j=1}^l v_{ij}^+ m_{ij} N_0 (z_{ij}^+ y_j). \quad (7)$$

Зависимость избыточной энергии связи между катионом сорта (i) и анионом сорта (j) в расплаве от состава расплава опишем с помощью ряда

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij} = & \sum_{m=1}^{i-1} \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_m} \right) x_m + \sum_{m=i+1}^k \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_m} \right) x_m + \\ & + \sum_{n=1}^{j-1} \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial y_n} \right) y_n + \sum_{n=j+1}^l \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial y_n} \right) y_n. \end{aligned} \quad (8)$$

В суперпозиционном приближении с учетом (7) конфигурационную энергию расплава можно представить в виде:

$$\begin{aligned} E = & \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l E_{ij}^0 m_{ij} + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l \mu_{ij}^+ m_{ij} N_0 y_j z_{ij}^+ \varepsilon_{ij} = \\ = & \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l E_{ij}^0 m_{ij} + \left(N_0 \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^+ m_{ij} \right) \sum_{i=1}^k x_i \sum_{j=1}^l y_j (N_0 z_{ij}^+ \varepsilon_{ij}). \end{aligned} \quad (9)$$

Приняв во внимание, то что

$$\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^+ z_{ij}^+ = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^- z_{ij}^-, \quad (10)$$

выражение (9) с учетом (2) и (8) преобразуем к виду

$$\begin{aligned} E = & \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l E_{ij}^0 m_{ij} + \left(N_0 \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^+ m_{ij} \right) \times \\ \times & \sum_{j=1}^l y_j \left[\sum_{i=1}^k \sum_{m=1}^{i-1} x_i x_m N_0 z_{ij}^+ \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_m} \right) + \right. \\ & + \sum_{i=1}^k \sum_{m=1}^{i-1} x_i x_m N_0 z_{ij}^+ \left. \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_m} \right) \right] + \left(N_0 \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^- m_{ij} \right) \sum_{i=1}^k x_i \times \\ \times & \left[\sum_{j=1}^l \sum_{n=1}^{j-1} y_j y_n N_0 z_{ij}^- \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial y_n} \right) + \right. \\ & + \sum_{j=1}^l \sum_{n=1}^{j-1} y_j y_n N_0 z_{ij}^- \left. \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial y_n} \right) \right]. \end{aligned} \quad (II)$$

Перегруппировав выражение (11) и введя дополнительные обозначения, приведем его к виду

$$\begin{aligned} E = & \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l E_{ij}^0 m_{ij} + \\ & + \left(\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^+ m_{ij} \right) \sum_{j=1}^l y_j \left(\sum_{i=1}^{k-1} \sum_{m=i+1}^k x_i x_m \Omega_{im}^{(j)} \right) + \\ & + \left(\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^- m_{ij} \right) \sum_{i=1}^k x_i \left(\sum_{j=1}^{l-1} \sum_{n=j+1}^l y_j y_n \Omega_{in}^m \right). \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь

$$\Omega_{im}^{(j)} = N_0 \left[z_{ij}^+ \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_m} \right) + z_{mj}^+ \left(\frac{\partial \varepsilon_{mj}}{\partial x_i} \right) \right], \quad (13)$$

$$\Omega_{in}^m = N_0 \left[z_{ij}^- \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial y_n} \right) + z_{in}^- \left(\frac{\partial \varepsilon_{in}}{\partial y_j} \right) \right] \quad (14)$$

- функции, характеризующие энергии образования бинарных расплавов из жидких молекулярных компонентов (ij) и (nj) (имеющих одинаковый анион сорта j) и бинарных расплавов из жидких молекулярных компонентов (ij) и (in) (имеющих одинаковый катион сорта i), а z_{ij}^- - координационные числа анионов в жидких компонентах (ij).

Допустим, что в расплавах с общими анионом сорта j концентрационные зависимости величин ε_{ij} и ε_{mj} описываются функциями

$$\varepsilon_{ij} = a_{mj}^{(j)} x_m + b_{im}^{(j)} x_i x_m, \quad (15)$$

$$\varepsilon_{mj} = a_{ij}^{(j)} x_i + b_{im}^{(j)} x_i x_m, \quad (16)$$

а в расплавах с общим катионом сорта i функциями

$$\varepsilon_{ij} = a_{in}^m y_n + b_{in}^m y_j y_n, \quad (17)$$

$$\varepsilon_{ij} = a_{in}^m y_j + b_{in}^m y_j y_n, \quad (18)$$

в которых параметры $a_{mj}^{(j)}$, $b_{im}^{(j)}$, a_{in}^m , b_{in}^m являются энергетическими константами. Подставив (15), (16) в (13), а (17), (18) в (14) и проведя дифференцирование, получим

$$\Omega_{im}^{(j)} = Q_{ij}^{(j)} + (z_{ij}^+ - z_{mj}^+) \cdot (x_i - x_m) q_{im}^{(j)}, \quad (19)$$

$$\Omega_{in}^m = Q_{in}^m + (z_{ij}^- - z_{in}^-) \cdot (y_j - y_n) q_{in}^m. \quad (20)$$

Здесь

$$Q_{ij}^{(m)} = N_0 \left(z_{ij}^+ a_{mj}^{(j)} + z_{mj}^+ a_{ij}^{(j)} \right), \quad (21)$$

$$Q_{in}^m = N_0 \left(z_{ij}^- a_{in}^m + z_{in}^- a_{ij}^m \right), \quad (22)$$

$$q_{im}^{(j)} = N_0 b_{im}^{(j)}, \quad (23)$$

$$(24)$$

- энергетические параметры модели.

Вводя в рассмотрение функцию состава расплава

$$\xi = \frac{\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^+ m_{ij}}{\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^- m_{ij}}, \quad (25)$$

равную отношению общего числа молей катионов к общему числу молей анионов в расплаве, с учетом записанных выше соотношений получим выражения для энергии расплава и парциальной молярной энергии произвольного компонента (st) в расплаве.

$$\begin{aligned} E &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l E_{ij}^0 m_{ij} + \\ &+ \left(\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^+ m_{ij} \right) \cdot \left[\left(\sum_{j=1}^l y_j \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{m=i+1}^k x_i x_m Q_{im}^{(j)} + \right. \right. \\ &+ \left. \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{m=i+1}^k x_i x_m (z_{ij}^+ - z_{mj}^+) \cdot (x_i - x_m) q_{im}^{(j)} \right) + \\ &+ \frac{1}{\xi} \left(\sum_{i=1}^k x_i \sum_{j=1}^{l-1} \sum_{n=j+1}^l y_j y_n Q_{in}^{(j)} + \right. \\ &+ \left. \sum_{j=1}^{l-1} \sum_{n=j+1}^l y_j y_n (z_{ij}^- - z_{in}^-) \cdot (y_j - y_n) q_{in}^{(j)} \right) \Big], \quad (26) \\ \overline{E}_{st} &= E_{st}^0 + \\ &+ \sum_{j=1}^l y_j \left\{ v_{st}^+ \left[\sum_{i=1}^{s-1} x_i \left(Q_{is}^{(j)} + (x_i - 2x_s) (z_{ij}^+ - z_{sj}^+) q_{is}^{(j)} \right) + \right. \right. \\ &+ \sum_{i=s+1}^k x_i \left(Q_{si}^{(j)} + (x_i - 2x_s) (z_{ij}^+ - z_{sj}^+) q_{si}^{(j)} \right) - \\ &- \left. \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{m=i+1}^k x_i x_m \left(Q_{im}^{(j)} + 2(x_i - x_m) \cdot (z_{ij}^+ - z_{mj}^+) q_{im}^{(j)} \right) \right] + \\ &+ v_{st}^- \xi \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{m=i+1}^k x_i x_m \left(Q_{im}^{(t)} - Q_{im}^{(j)} \right) + \\ &+ (x_i - x_m) \left[(z_{it}^+ - z_{mt}^+) q_{im}^{(t)} - (z_{ij}^+ - z_{mj}^+) q_{im}^{(j)} \right] \Big\} + \\ &+ \sum_{i=1}^k x_i \left\{ v_{st}^- \left[\sum_{j=1}^{l-1} y_j \left(Q_{it}^{(j)} + (y_j - 2y_l) (z_{ij}^- - z_{it}^-) q_{it}^{(j)} \right) + \right. \right. \\ &+ \sum_{j=l+1}^l y_j \left(Q_{it}^{(j)} + (y_j - 2y_l) (z_{ij}^- - z_{it}^-) q_{it}^{(j)} \right) - \\ &- \left. \sum_{j=1}^{l-1} \sum_{n=j+1}^l y_j y_n \left(Q_{in}^{(j)} + 2(y_j - y_n) \times \right. \right. \\ &\times \left. \left. (z_{ij}^- - z_{in}^-) q_{in}^{(j)} \right) \right] + \frac{v_{st}^+}{\xi} \sum_{j=1}^{l-1} \sum_{n=j+1}^l y_j y_n \left(Q_{st}^{(j)} - Q_{in}^{(j)} \right) + \\ &+ (y_j - y_n) \left[(z_{sj}^- - z_{sn}^-) q_{st}^{(j)} - (z_{ij}^+ - z_{mj}^+) q_{im}^{(j)} \right] \Big\}. \quad (27) \end{aligned}$$

Энтропию расплава выразим соотношением

$$S = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l S_{ij}^0 m_{ij} + S^{\text{ид}} + S^{\text{изб}}, \quad (28)$$

в котором: S_{ij}^0 – молярная энтропия чистого жидкого компонента (ij), $S^{\text{ид}}$ – энтропия образования

совершенного ионного раствора, а $S^{\text{изб}}$ – избыточная энтропия смешения жидких компонентов.

Поскольку теплоемкость шлакового расплава примерно соответствует аддитивно сложным теплоемкостям чистых жидких компонентов, будем считать слагаемые $S^{\text{ид}}$ и $S^{\text{изб}}$ независимыми от температуры и являющимися лишь функциями состава расплава.

Энтропия образования совершенного ионного раствора определяется произведением чисел случайных перестановок катионов друг с другом и анионов друг с другом. Ее концентрационная зависимость характеризуется формулой

$$\begin{aligned} S^{\text{ид}} &= -R \left[\sum_{i=1}^k \left(\sum_{j=1}^l v_{ij}^+ m_{ij} \right) \ln(x_i) + \right. \\ &+ \left. \sum_{j=1}^l \left(\sum_{i=1}^k v_{ij}^- m_{ij} \right) \ln(y_j) \right]. \quad (29) \end{aligned}$$

Концентрационную зависимость избыточной энтропии смешения представим в виде уравнения

$$\begin{aligned} S^{\text{изб}} &= \left(\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^l v_{ij}^+ m_{ij} \right) \cdot \left[\sum_{j=1}^l y_j \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{m=i+1}^k x_i x_m \alpha_{im}^{(j)} + \right. \\ &+ \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{m=i+1}^k x_i x_m (z_{ij}^+ - z_{mj}^+) (x_i - x_m) \beta_{im}^{(j)} \Big] + \\ &+ \frac{1}{\xi} \left(\sum_{i=1}^k x_i \sum_{j=1}^{l-1} \sum_{n=j+1}^l y_j y_n \alpha_{in}^{(j)} + \right. \\ &+ \left. \sum_{j=1}^{l-1} \sum_{n=j+1}^l y_j y_n (z_{ij}^- - z_{in}^-) (y_j - y_n) \beta_{in}^{(j)} \right) \Big], \quad (30) \end{aligned}$$

в котором $\alpha_{im}^{(j)}$, $\beta_{im}^{(j)}$, $\alpha_{in}^{(j)}$, $\beta_{in}^{(j)}$ являются постоянными величинами (энтропийными параметрами модели).

Воспользовавшись зависимостями (29) и (30) проведя дифференцирование уравнения (28) по числу молей произвольного компонента (st) получим выражение для парциальной молярной энтропии компонента,

$$\begin{aligned} \overline{S}_{st} &= S_{st}^0 + \\ &+ \sum_{j=1}^l y_j \left\{ v_{st}^+ \left[\sum_{i=1}^{s-1} x_i \left(\alpha_{is}^{(j)} + (x_i - 2x_s) (z_{ij}^+ - z_{sj}^+) \beta_{is}^{(j)} \right) + \right. \right. \\ &+ \sum_{i=s+1}^k x_i \left(\alpha_{si}^{(j)} + (x_i - 2x_s) (z_{ij}^+ - z_{sj}^+) \beta_{si}^{(j)} \right) - \\ &- \left. \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{m=i+1}^k x_i x_m \left(\alpha_{im}^{(j)} + 2(x_i - x_m) \times \right. \right. \\ &\times \left. \left. (z_{ij}^+ - z_{mj}^+) \beta_{im}^{(j)} \right) \right] + v_{st}^- \xi \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{m=i+1}^k x_i x_m \left(\alpha_{im}^{(t)} - \alpha_{im}^{(j)} \right) + \\ &+ (x_i - x_m) \left[(z_{it}^+ - z_{mt}^+) \beta_{im}^{(t)} - (z_{ij}^+ - z_{mj}^+) \beta_{im}^{(j)} \right] \Big\} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i=1}^k x_i \left\{ v_{st}^- \left[\sum_{j=1}^{i-1} y_j \left(\alpha_{(i)}^{jt} + (y_j - 2y_i) (z_{ij}^- - z_{ii}^-) \beta_{(i)}^{jt} \right) + \right. \right. \\
& + \sum_{j=i+1}^l y_j \left(\alpha_{(i)}^{ij} + (y_j - 2y_i) (z_{ij}^- - z_{ii}^-) \beta_{(i)}^{ij} \right) - \\
& \left. \left. - \sum_{j=1}^{i-1} \sum_{n=j+1}^l y_j y_n \left(\alpha_{(i)}^{jn} + 2(y_j - y_n) \cdot (z_{ij}^- - z_{in}^-) \beta_{(i)}^{jn} \right) \right] + \right. \\
& + \frac{v_{st}^+}{\xi} \sum_{j=1}^{i-1} \sum_{n=j+1}^l y_j y_n \left(\alpha_{(s)}^{jn} - \alpha_{(i)}^{jn} \right) + (y_j - y_n) \times \\
& \left. \times \left[(z_{sj}^- - z_{sn}^-) \beta_{(s)}^{jn} - (z_{ij}^+ - z_{mj}^+) \beta_{(im)}^{(j)} \right] \right\}. \quad (31)
\end{aligned}$$

Используя уравнения (27) и (31) несложно перейти к выражению для химического потенциала произвольного компонента (si) в шлаковом расплаве

$$\mu_{st} = \overline{E}_{st} - T \overline{S}_{st}, \quad (32)$$

а также к выражению для его активности

$$a_{(st)} = \exp \left(\frac{\overline{E}_{st}^{изб} - T \overline{S}_{st}^{изб}}{RT} \right). \quad (33)$$

Термодинамическая модель шлакового расплава с произвольным числом сортов катионов и анионов, предложенная в данной работе, сохраняет все основные достоинства опубликованной ранее [6] модели оксидного шлака. Полученные термодинамические зависимости связывают свойства простых и неограниченно сложных по составу систем, обладают хорошими интерполяционными возможностями, разумной гибкостью, изменяющейся в зависимости от структуры и природы исходных компонентов расплава. В силу указанных обстоятельств выведенные соотношения могут найти практическое применение в термодинамических исследованиях, направленных на обобщение и дополнение имеющейся информации о свойствах шлаковых расплавов, моделировании термодинамических характеристик жидких шлаков, а также в расчетах высокотемпературных равновесий в системах с их участием.

Выводы

1. С учетом ионной природы жидких шлаков на основе островной модели строения ионных жидкостей разработана термодинамическая модель шлакового расплава, содержащего произвольное число сортов катионов и анионов.

2. Выведены уравнения для основных термодинамических характеристик жидких шлаков (энтальпии и энтропии образования расплавов, парциальных молярных свойств компонентов, активности компонентов), выражающие их зависимость от состава и температуры системы.

3. Полученные соотношения связывают свойства простых и сложных по составу ионных рас-

плавов, обладают хорошими интерполяционными возможностями и могут найти практического применения в термодинамических исследованиях.

Литература

1. Есин, О.А. Физическая химия пирометаллургических процессов / О.А. Есин, П.В. Гельд. — М.: Металлургия, 1966. — Ч.2.- 704 с.
2. Кожеев, В.А. Термодинамика металлургических шлаков / В.А. Кожеев. — Свердловск: Металлургиздат, 1955. — 163 с.
3. Эллиот, Д. Ф. Термохимия сталеплавильных процессов / Д.Ф. Эллиот, М. Глейзер, В. Рамакришна. — М.: Металлургия, 1969. — 252 с.
4. Атлас шлаков: справ, изд.; пер. с нем.- М.: Металлургия, 1985. — 208 с.
5. Slag Atlas. 2nd Edition. Verlag Stahleisen GmbH. Dusseldorf, 1995. — 616s.
6. Власов, В.Н. К термодинамике жидких металлургических шлаков / В.Н. Власов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». — 2004. — Вып. 4. — № 8(37). — С. 3-8.
7. Дифракционные исследования строения высокотемпературных расплавов / Э.А. Пастухов, Н.А. Ватолин, В.Л. Лисин, В.М. и др. — Екатеринбург: УрОРАН, 2003. — 335 с.
8. Власов, В.Н. Высокотемпературные фазовые равновесия и термодинамические свойства расплавов в системе $CaOSiO_2$ / В.Н. Власов, Е.А. Мамонтова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». — 2005. — Вып. 6.-№ 10(50). — С. 21-26.
9. Власов, В.Н. Комплексное моделирование высокотемпературных фазовых равновесий в системе $CaO-Al_2O_3$ / В.Н. Власов, С.В. Герасимова // Компьютерное моделирование физико-химических свойств стекол и расплавов: труды 8 Российского семинара. — Курган: Изд-во Курганского гос. ун-та, 2006. — С. 46-48.
10. Власов, В.Н. Фазовые равновесия и термодинамические свойства расплавов в системе $MgO-SiO_2$ / В.Н. Власов, А.А. Беляев // Современные проблемы электрометаллургии стали: материалы XIII Международной конф.. — Челябинск: Изд-во ЮУрГУ. — Ч.1.- 2007. — С. 82-88.
11. Власов, В.Н. Термодинамическое моделирование распределение элементов в процессах выплавки силикомарганца в рудовосстановительных электропечах / В.Н. Власов, Ю.А. Агеев, В.Б. Шмыга // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». — 2003. — Вып. 3. — № 2(18). — С. 47-50.
12. Власов, В.Н. Влияние состава шлака выплавки силикомарганца на содержание в нем оксида марганца / В.Н. Власов, Ю.А. Агеев, В.Б. Шмыга // Проблемы и перспективы развития ферросплавного производства ОАО «ТНК Казхром» — Актобе. — 2003. — С. 425-429.